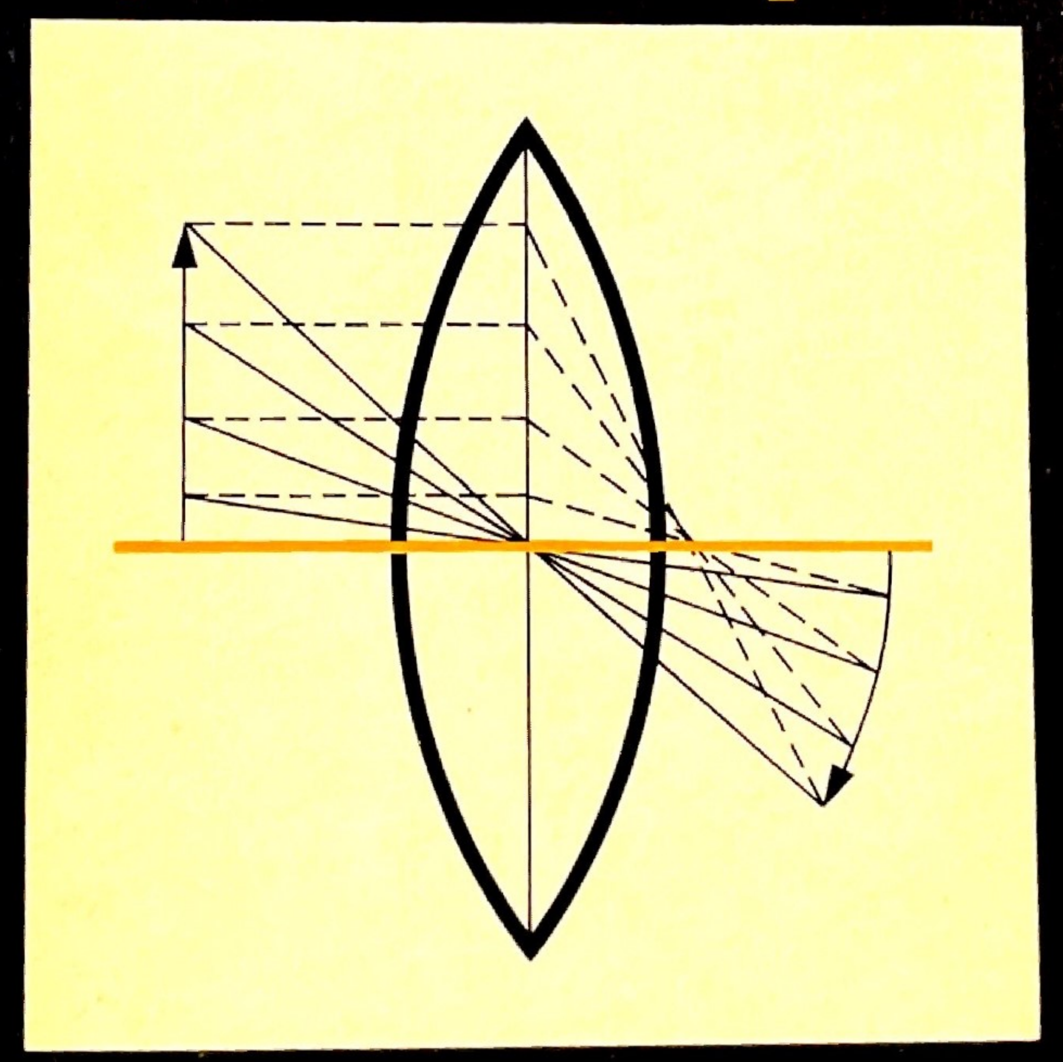
SCHILLING

# Optik und Spektroskopie



PHYSIK IN BEISPIELEN

*Physik*
*in Beispielen*

Schilling
**Optik und Spektroskopie**

# Physik in Beispielen

# Optik und Spektroskopie

von Prof. Dr. rer. nat. habil. Heinz Schilling

---

Mit 113 durchgerechneten Beispielen und
325 Aufgaben mit Lösungen



VEB FACHBUCHVERLAG LEIPZIG

1. Auflage
Lizenznummer 114-210/42/80
LSV 1164
Verlagslektor: Dipl.-Phys. Klaus Vogelsang
Gestaltung: Sabine Panster
Printed in GDR
Satz und Druck: VEB Druckhaus „Maxim Gorki“, 7400 Altenburg
Redaktionsschluß: 15. 6. 1980
Bestellnummer: 546 431 9
DDR 19,00 M

# Vorwort

Das Buch „Optik“ als sechster Band der Reihe „Physik in Beispielen“ vermittelt die Grundlagen der modernen Optik in Form kurzgefaßter Einführungstexte und ausgewählter Beispiele.
Sein Inhalt sind die Reflexion und die Brechung des Lichtes, Interferenz und Beugung, der Aufbau der wichtigsten optischen Instrumente. Auf der Grundlage der Quantentheorie werden die Lichtemission und -absorption sowie die Spektren der Atome behandelt. Die Darstellung der Gesetzmäßigkeiten bei den Spektren symmetrischer Moleküle erfolgt mit Hilfe der Gruppentheorie. Den Abschluß des Buches bilden die Grundgesetze der induzierten Emission, des Lasers und der Holografie. Die MAXWELLsche Theorie elektromagnetischer Felder, die Quantentheorie und die Gruppentheorie sind in zusammenfassenden Übersichten dargestellt.
Für ihren Rat bei der Gestaltung des Buches danke ich den Herren Prof. Dr. habil. HAFERKORN, TH Ilmenau, Dr. LENK, Dr. habil. SCHULZ und Dr. TILCH vom Zentralinstitut für Optik und Spektroskopie der AdW. Herr Dr. ORTLIEB und Herr Dr. STEIGER, Zentralinstitut für Physikalische Chemie der AdW, berieten mich zu speziellen Fragen der Spektroskopie. Meine Gattin, Frau Ing. R. SCHILLING, unterstützte mich mit dem Entwurf der Abbildungen. Dem Verlag danke ich für vielfältige Hinweise und Anregungen.

Der Verfasser

# Inhaltsverzeichnis

# 1. Physikalische und mathematische Grundlagen der Optik

## 1.1. Einheiten der Strahlungsphysik und der Fotometrie

### E Einführung

*Grundgrößen der Strahlungsphysik*

Als **Strahlungsmenge** oder -energie $Q$ definiert man die gesamte in Form von Strahlung auftretende Energie. Sie wird in Joule (J) gemessen. Der **Strahlungsfluß**

$$\Phi_e = \frac{dQ}{dt} \tag{1}$$

gibt die im Strahlungsfeld umgesetzte Leistung der Energiequelle an (Einheit Watt, W). Die **Strahlstärke**

$$I_e = \frac{d\Phi_e}{d\Omega} \tag{2}$$

($\Omega$ Raumwinkel) kennzeichnet den von der Strahlungsquelle in eine vorgegebene Richtung ausgehende Strahlungsfluß, bezogen auf die Einheit des Raumwinkels. Ihre Maßeinheit ist Watt/Steradiant (W/sr). Den auf die Fläche bezogenen Strahlungsfluß

$$L_e = \frac{d\Phi_e}{dA} \tag{3}$$

definiert man als Strahlungsflußdichte bzw. **Strahldichte.** Sie hat die Maßeinheit $W\,m^{-2}$.

**Beispiel 1.1.1. Strahlungsfluß und Strahldichte**

Eine Lichtquelle mit dem Strahlungsfluß 10 W, deren Licht zur Hälfte von einer Fläche von 50 cm² aufgefangen wird, erzeugt dort die Strahldichte (bzw. Bestrahlungsstärke)

$$L_e = \frac{1}{2}\,\frac{10}{50 \cdot 10^{-4}}\,W\,m^{-2} = 1\,000\,W\,m^{-2}.$$

Im allgemeinen setzt sich die Strahlung aus verschiedenen Frequenzen $f$ oder Wellenlängen $\lambda$ zusammen. Der auf die Einheit des Wellenlängenbereiches bezogene Anteil des Strahlungsflusses

$$\Phi_\lambda = \frac{\mathrm{d}\Phi_\mathrm{e}}{\mathrm{d}\lambda} \tag{4}$$

und der auf die Einheit der Frequenz bezogene Anteil

$$\Phi_f = \frac{\mathrm{d}\Phi_\mathrm{e}}{\mathrm{d}f} \tag{5}$$

heißen **spektraler Strahlungsfluß** (Maßeinheiten W $\mathrm{m}^{-1}$ bzw. J). In gleicher Weise können die spektrale Strahlstärke

$$I_{\mathrm{e}\lambda} = \frac{\mathrm{d}\Phi_\lambda}{\mathrm{d}\Omega} \quad (4\mathrm{a}) \qquad \text{bzw.} \qquad I_{\mathrm{e}f} = \frac{\mathrm{d}\Phi_f}{\mathrm{d}\Omega} \quad (5\mathrm{a})$$

und die spektrale Strahldichte

$$L_{\mathrm{e}\lambda} = \frac{\mathrm{d}\Phi_\lambda}{\mathrm{d}A} \quad (4\mathrm{b}) \qquad \text{bzw.} \qquad L_{\mathrm{e}f} = \frac{\mathrm{d}\Phi_f}{\mathrm{d}A} \quad (5\mathrm{b})$$

definiert werden.

*Fotometrie*

Unter Fotometrie versteht man im weitesten Sinne die Technik zur Messung der Energiegrößen eines optischen Strahlungsfeldes. Im engeren Sinne befaßt sich die Fotometrie mit der Wirkung des sichtbaren Lichtes auf das menschliche Auge. Den folgenden Ausführungen liegt die engere Auffassung zugrunde.
Für die praktischen Bedürfnisse der Beleuchtung ist die Reizwirkung auf das normale menschliche Auge von Interesse. Diese hängt von der Spektralempfindlichkeit $V(\lambda)$ des Auges ab. Sie ist beim Menschen für die Wellenlänge $\lambda = 555$ nm am größten. Auf diese bezogen, wird die **relative spektrale Hellempfindlichkeit**

$$K(\lambda) = \frac{V(\lambda)}{V(555\ \mathrm{nm})} \tag{6}$$

definiert (vgl. Tab. 1.1.1 und Bild 1.1.1). Sie entspricht den statistischen Mittelwerten und wurde durch internationale Übereinkunft festgelegt.
Zur Definition der Spektralempfindlichkeit $V(\lambda)$ selbst ist es notwendig, die fotometrischen Grundgrößen einzuführen.
Der **Lichtstrom** $\Phi_\mathrm{L}$ entspricht dem vom Auge wahrgenommenen Strahlungsfluß, die **Lichtstärke**

$$I_\mathrm{L} = \frac{\mathrm{d}\Phi_\mathrm{L}}{\mathrm{d}\Omega} \tag{7}$$

der empfundenen Strahlungsstärke. Größere Bedeutung kommt der **Beleuchtungsstärke**

$$E = \frac{\mathrm{d}\Phi_{\mathrm{L}A}}{\mathrm{d}A} \tag{8}$$

zu, die den Quotienten aus dem auf eine Fläche fallenden Lichtstrom $\Phi_{LA}$ und deren Größe $A$ angibt.

Für die Lichtgrößen werden selbständige Einheiten verwendet, wodurch sie leicht von den Strahlungsgrößen zu unterscheiden sind. Einheit der Lichtstärke ist die **Candela** (cd). Ihre Definition geht vom Schwarzen Strahler bei der Temperatur des unter Atmosphärendruck erstarrenden Platins (2042 K) aus. Diese Lichtquelle wird als Standard-Lichtquelle eingeführt. Sie erzeugt je 1 cm² ihrer Fläche einen Lichtstrom mit der Lichtstärke 60 cd. Diese Strahlung geht in den Halbraum, d. h., sie erstreckt sich über den Raumwinkel $2\pi$ sr.

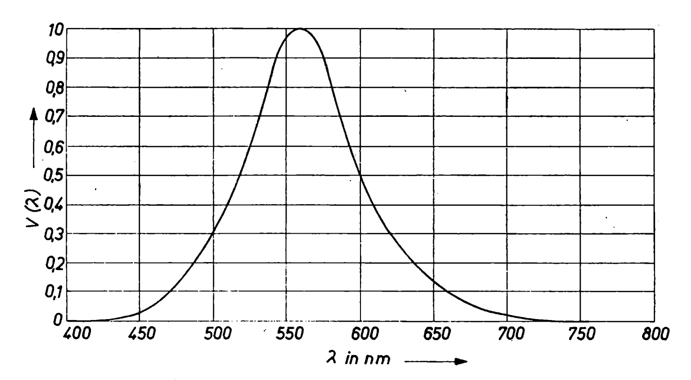



Bild 1.1.1. Relative spektrale Hellempfindlichkeit (Spektralempfindlichkeit) $V(\lambda)$ des menschlichen Auges

Der Lichtstrom selbst wird in **Lumen** (lm) gemessen. Er ist das Produkt aus Lichtstärke (in cd) und Raumwinkel (in sr):

$$\boxed{1\ \text{lm} = 1\ \text{cd} \cdot 1\ \text{sr}}\,.$$

Die Einheit der Beleuchtungsstärke ist das **Lux** (lx):

$$\boxed{1\ \text{lx} = 1\ \text{lm}\ \text{m}^{-2}}\,.$$

Nach Festlegung des Lichtstromes ist es möglich, die **Spektralempfindlichkeit** bzw. Sichtbarkeit $V(\lambda)$ zu definieren. Sie gibt das Verhältnis zwischen dem Lichtstrom $\Phi_L(\lambda)$ einer monochromatischen Lichtquelle und ihrem Strahlungsfluß $\Phi_e(\lambda)$ an:

$$V(\lambda) = \frac{\Phi_L(\lambda)}{\Phi_e(\lambda)}\,. \tag{9}$$

$V(\lambda)$ hat die Maßeinheit lm W⁻¹.

Zur Bestimmung des Absolutwertes der spektralen Empfindlichkeit $V(\lambda)$ geht man von der Definition für die Standard-Lichtquelle aus: Der Lichtstrom ergibt sich gemäß

$$\Phi_L = \int\limits_{\substack{\text{sichtbarer}\\ \text{Bereich}}} \Phi_\lambda(\lambda)\, V(\lambda)\, \mathrm{d}\lambda = V(555\ \text{nm}) \int\limits_{\substack{\text{sichtbarer}\\ \text{Bereich}}} \Phi_\lambda(\lambda)\, K(\lambda)\, \mathrm{d}\lambda \tag{10}$$

aus der spektralen Strahlungsflußdichte $\Phi_\lambda$ und der Spektralempfindlichkeit $V(\lambda)$. Nach dem PLANCKschen Strahlungsgesetz (vgl. [3] 4.2./2 und 4.2.1./7) ist die spektrale Strahldichte der Standardlichtquelle

$$L_{e\lambda} = L_{ef}\frac{c}{\lambda^2} = \frac{hc^2}{\lambda^5\left(e^{\frac{hc}{kT\lambda}} - 1\right)}, \tag{11}$$

wobei entsprechend der vereinbarten Festlegung $T = 2042$ K einzusetzen ist.
Die Ausstrahlung in den Halbraum ergibt den Lichtstrom 60 cd · 2π sr = 120π lm, so daß man die Beziehung

$$10^{-4}\, V(555\ \text{nm}) \int\limits_{\substack{\text{sichtbarer}\\ \text{Bereich}}} K(\lambda)\, L_{e\lambda}(\lambda)\, \mathrm{d}\lambda = 120\pi\ \text{lm} \tag{12}$$

erhält. Hierin ist $K(\lambda)$ gemäß internationaler Übereinkunft festgelegt (vgl. Tab. 1.1.1 bzw. Bild 1.1.1). Das Integral in (12) ist daher numerisch auswertbar. $V(555\ \text{nm})$ läßt sich somit durch Rechnung ermitteln. Diese ergibt

$$\boxed{V(555\ \text{nm}) = \frac{1}{M} = 683\ \text{lm W}^{-1}}\,. \tag{13}$$

$V(555\ \text{nm})$ heißt **fotometrisches Strahlungsäquivalent**, der Kehrwert

$$M = 1{,}46 \cdot 10^{-3}\ \text{W lm}^{-1}$$

**Lichtäquivalent.**

**Beispiel 1.1.2. Strahlungsfluß, Lichtstrom, Beleuchtungsstärke**

Die monochromatische Strahlung mit der Wellenlänge $\lambda = 555$ nm, d. h. im Maximum der Sichtbarkeit, erzeugt bei der Strahlungsleistung 1 W den Lichtstrom 683 lm. Dagegen liefert die monochromatische Strahlung mit der Wellenlänge $\lambda = 470$ nm bei einem Watt Strahlungsleistung nach Tab. 1.1.1 nur den Lichtstrom $\Phi_L = 683 \cdot 1 \cdot 0{,}091\ \text{lm} = 62{,}2\ \text{lm}$. Fällt dieser vollständig auf eine Fläche von 2 m², erzeugt er dort die Beleuchtungsstärke 31,1 lx.



## Probleme

### 1.1.1. Größen des Strahlungsfeldes

Eine 500-Watt-Lampe setze 2% der Energie in Licht des sichtbaren Bereiches um. Die Lichtquelle werde als punktförmiger Strahler vorausgesetzt, der das Licht in alle Richtungen gleichmäßig aussendet.
Berechnen Sie den Strahlungsfluß und die Strahlstärke der Lichtquelle. Wie groß ist im Abstand 3 m von der Lichtquelle die Bestrahlungsstärke bzw. Strahldichte? Welcher spektrale Strahlungsfluß ergibt sich, wenn dieser über den Bereich des sichtbaren Lichtes von 390 bis 780 nm als gleich angenommen wird? Wie groß ist im Abstand 3 m die spektrale Strahldichte?

**Lösung:**

Der Strahlungsfluß im sichtbaren Bereich beträgt

$$\Phi_e = 500 \cdot 0{,}02\ \mathrm{W} = 10\ \mathrm{W}.$$

Daraus folgt für den in den Raumwinkel $4\pi$ aussendenden Rundstrahler die Strahlstärke

$$I_e = \frac{10}{4\pi}\ \mathrm{W\,sr^{-1}} = 0{,}796\ \mathrm{W\,sr^{-1}}.$$

Im Abstand $r = 1$ m beträgt die Bestrahlungsstärke hiernach $0{,}796\ \mathrm{W\,m^{-2}}$. Für den Abstand $r = 3$ m erhält man

$$L_e = \frac{10}{4\pi r^2}\ \mathrm{W\,m^{-2}} = 0{,}0884\ \mathrm{W\,m^{-2}}.$$

Als spektraler Strahlungsfluß ergibt sich wegen $\Delta\lambda = 390$ nm

$$\Phi_\lambda = \frac{10}{390 \cdot 10^{-9}}\ \mathrm{W\,m^{-1}} = 2{,}56 \cdot 10^7\ \mathrm{W\,m^{-1}}.$$

Die spektrale Strahldichte im Abstand 3 m beträgt

$$L_{e\lambda} = \frac{0{,}0884}{390 \cdot 10^{-9}}\ \mathrm{W\,m^{-3}} = 2{,}27 \cdot 10^5\ \mathrm{W\,m^{-3}}.$$

### 1.1.2. Beleuchtung einer Fläche

Eine Fläche $A$ wird mit Licht bestrahlt, das unter dem Winkel $\varphi = 30°$ gegen die Flächennormale auftrifft. Die Strahlung enthält den Wellenlängenbereich zwischen 590 nm und 640 nm. Bei $\lambda = 590$ nm beträgt die spektrale Strahldichte $L_{e1} = 2 \cdot 10^4\ \mathrm{W\,m^{-3}}$. Sie fällt bis $\lambda = 640$ nm linear auf Null ab. Berechnen Sie die Strahldichte $L_e$ durch die Fläche $A$ und deren Beleuchtungsstärke $E$. Dabei kann genähert davon ausgegangen werden, daß die relative Spektralempfindlichkeit $K(\lambda)$ von $K_1 = 0{,}757$ bei 590 nm auf $K_2 = 0{,}175$ bei 640 nm linear mit der Wellenlänge abfällt.

**Lösung:**

Die Strahldichte ist gleich

$$L_e = \cos\varphi \int_{\lambda_1}^{\lambda_2} L_{e\lambda}\,\mathrm{d}\lambda. \tag{1}$$

Bei der Berechnung der Beleuchtungsstärke ist die spektrale Empfindlichkeit zu berücksichtigen:

$$V(\lambda) = \frac{K(\lambda)}{M}, \tag{2}$$

$$E = \frac{\cos\varphi}{M} \int_{\lambda_1}^{\lambda_2} L_{e\lambda} K(\lambda)\,\mathrm{d}\lambda. \tag{3}$$

Darin können wir entsprechend der vorgegebenen Lichtquelle

$$L_{e\lambda} = \frac{L_{e1}}{\lambda_2 - \lambda_1}(\lambda_2 - \lambda) \tag{4}$$

setzen.

Auf Grund der Näherung für den Abfall der spektralen Empfindlichkeit erhalten wir

$$K(\lambda) = \frac{\lambda_2 K_1 - \lambda_1 K_2 - (K_1 - K_2)\,\lambda}{\lambda_2 - \lambda_1}. \tag{5}$$

Einsetzen in (1) ergibt für die Strahlungsflußdichte

$$L_\mathrm{e} = \frac{L_{\mathrm{e}1} \cos \varphi}{\lambda_2 - \lambda_1} \int\limits_{\lambda_1}^{\lambda_2} (\lambda_2 - \lambda)\, \mathrm{d}\lambda = \frac{L_{\mathrm{e}1} \cos \varphi}{2} (\lambda_2 - \lambda_1). \tag{6}$$

Für die Beleuchtungsstärke $E$ folgt aus (3) unter Verwendung von (4) und (5)

$$E = \frac{L_{\mathrm{e}1} \cos \varphi}{M(\lambda_2 - \lambda_1)^2} \int\limits_{\lambda_1}^{\lambda_2} (\lambda_2 - \lambda)\, [\lambda_2 K_1 - \lambda_1 K_2 - (K_1 - K_2)\,\lambda]\, \mathrm{d}\lambda \tag{7}$$

und nach Ausführung der Integration

$$E = \frac{L_{\mathrm{e}1} \cos \varphi}{M(\lambda_2 - \lambda_1)^2} \left[ \frac{1}{2} (K_1 + K_2)\, (\lambda_2 - \lambda_1)\, (\lambda_1^2 + \lambda_2^2 - \lambda_1 \lambda_2) + \frac{1}{3} (K_1 - K_2)\, (\lambda_2^3 - \lambda_1^3) \right]. \tag{8}$$

Mit den vorgegebenen Werten erhalten wir aus (6)

$$L_\mathrm{e} = \frac{2 \cdot 10^4 \cdot 0{,}866}{2} \cdot 50 \cdot 10^{-9}\ \mathrm{W\,m^{-2}} = 0{,}433\ \mathrm{mW\,m^{-2}}$$

und aus (8)

$$\begin{aligned} E &= \frac{2 \cdot 10^4 \cdot 0{,}866}{(50 \cdot 10^{-9})^2} \cdot 683\, [0{,}466 \cdot 50(34{,}8 + 41{,}0 - 37{,}8) \cdot 10^{-23} \\ &\quad + 0{,}194(262{,}1 - 205{,}4) \cdot 10^{-21}]\ \mathrm{lx} \\ &= 93{,}9\ \mathrm{lx}. \end{aligned}$$



## Aufgaben

A 1.1.1. Welche Strahlungsleistung ist für die Beleuchtung einer Fläche von 2 m² für Arbeit höchster Präzision (4000 lx) erforderlich, wenn eine relative Spektralempfindlichkeit $K = 0{,}5$ angenommen wird?

A 1.1.2. Welche Strahldichte erzeugt ein Rundstrahler mit dem Energiefluß 10 W im Abstand 5 m?

A 1.1.3. Eine Lichtquelle der Wellenlänge $\lambda = 450$ nm strahlt mit dem Energiefluß 150 W in den Halbraum. Wie groß ist die Beleuchtungsstärke einer Fläche im Abstand 10 m?

A 1.1.4. Der schwarze Strahler emittiert Licht über den gesamten Frequenzbereich proportional $T^4$. Berechnen Sie den Lichtstrom in den Halbraum durch einen schwarzen Strahler bei $T = 1000$ K.

A 1.1.5. Berechnen Sie zu Aufgabe A 1.1.4. die Beleuchtung einer Fläche im Abstand 3 m bei senkrechtem Auftreffen der Strahlen.

A 1.1.6. Mit Plasmaniederdruckstrahlern wird eine Lichtausbeute von 80 lm $W^{-1}$ erreicht. Welche elektrische Leistung ist erforderlich, um, 3 m von der Strahlungsquelle entfernt, die Beleuchtungsstärke 100 lx zu erzielen?

A. 1.1.7. Das Licht eines Hochdruckplasmastrahlers mit der Lichtausbeute 110 lm $W^{-1}$ wird auf eine 20 $m^2$ große Fläche gerichtet, wobei eine Beleuchtungsstärke von 4000 lx erzielt wird. Welche elektrische Leistung ist dafür aufzubringen?

## 1.2. Harmonische Schwingungen und Wellen

### E Einführung

*Einfache harmonische Schwingungen*

Ein harmonischer Vorgang, der sich periodisch in einer Sekunde $f$-mal wiederholt, läßt sich mathematisch in den Formen

$$\psi = A \sin 2\pi f t \quad (1\text{a}) \qquad \text{oder} \qquad \psi = A \cos 2\pi f t \quad (1\text{b})$$

darstellen. $\psi$ bedeutet die zeitliche Auslenkung, $A$ die Amplitude bzw. maximale Auslenkung, $t$ die Zeit. $f$ heißt die Frequenz, $2\pi f t$ die Phase bzw. der Phasenwinkel. Zur vereinfachten Darstellung führt man die Kreisfrequenz $\omega = 2\pi f$ ein. Die beiden Formen (1a) und (1b) beschreiben den gleichen physikalischen Vorgang. Sie unterscheiden sich lediglich in der Wahl des Anfangspunktes für die Zeitrechnung.

Das Rechnen mit den trigonometrischen Funktionen führt häufig zu unübersichtlichen Formeln. Im allgemeinen wird daher anstelle sin $\omega t$ oder cos $\omega t$ die Exponentialfunktion mit imaginärem Argument $e^{i\omega t}$ verwendet und dabei die Eulersche Formel

$$e^{i\omega t} = \cos \omega t + i \sin \omega t \quad (2)$$

ausgenutzt.

Im Endergebnis physikalischer Berechnungen müssen meßbare Größen mit reellen Werten auftreten. Gleichungen zwischen komplexen Größen gelten sowohl für den Real- als auch für den Imaginärteil. In komplexen Größen kann daher sowohl der Real- als auch der Imaginärteil für eine physikalische Aussage benutzt werden.

Der Vorteil komplexer Größen tritt bei der Überlagerung von Schwingungen gleicher Frequenz, jedoch verschiedener Phase und Amplitude hervor. Es seien

$$\psi_1 = A_1 \sin \omega t \quad (3\text{a}), \qquad \psi_2 = A_2 \sin (\omega t + \delta) \quad (3\text{b})$$

zwei harmonische Schwingungen. Wie der Summand $\delta$ im Argument bei (3b) zeigt, haben sie gegeneinander die Phasenverschiebung $\delta$.

Die zeitlich variable Größe

$$\psi_1 = A_1 e^{i\omega t} \quad (4\text{a})$$

stellt in der Gaussschen Zahlenebene nach Bild 1.2.1 einen Vektor der Länge $A_1$ dar, der mit der Winkelgeschwindigkeit $\omega$ um den Ursprungspunkt rotiert. Mit der gleichen Drehgeschwindigkeit, jedoch um den Winkel $\delta$ vorauseilend, rotiert der Vektor

$$\psi_2 = A_2 e^{i(\omega t + \delta)}, \quad (4\text{b})$$

der die Schwingung (3b) charakterisiert. Durch Addition folgt

$$\psi = \psi_1 + \psi_2 = A \, \mathrm{e}^{\mathrm{i}(\omega t + \varphi)}. \tag{4}$$

Wie man aus Bild 1.2.1 unter Anwendung des Sinus- und des Cosinussatzes abliest, ergeben sich $A$ und $\varphi$ auf Grund der Beziehungen

$$A = \sqrt{A_1^2 + A_2^2 + 2A_1A_2 \cos \delta}, \tag{5}$$

$$\sin \varphi = \frac{A_2 \sin \delta}{\sqrt{(A_1 + A_2 \cos \delta)^2 + A_2 \sin^2 \delta}}. \tag{6}$$

Ebenso kann die Überlagerung mehrerer Schwingungen gleicher Frequenz behandelt werden.

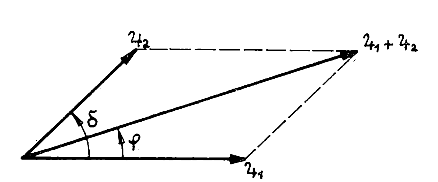



Bild 1.2.1. Überlagerung zweier Schwingungen

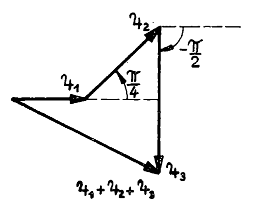



Bild 1.2.2. Überlagerung dreier Schwingungen nach Beispiel 1.2.1.

**Beispiel 1.2.1. Überlagerung mehrerer Schwingungen**

Überlagert werden die Schwingungen

$$\cos \omega t, \qquad \sqrt{2} \cos \left(\omega t + \frac{\pi}{4}\right), \qquad 2 \sin \omega t.$$

Anstelle $\sin \omega t$ schreiben wir $\cos \left(\omega t - \frac{\pi}{2}\right)$ und addieren in der Gaussschen Zahlenebene die drei Vektoren

$$\psi_1 = \mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega t}, \qquad \psi_2 = \sqrt{2}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\left(\omega t + \frac{\pi}{6}\right)}, \qquad \psi_3 = 2\mathrm{e}^{\mathrm{i}\left(\omega t - \frac{\pi}{2}\right)}.$$

Wie aus Bild 1.2.2 hervorgeht, ergibt der resultierende Vektor

$$\psi = \psi_1 + \psi_2 + \psi_3 = \sqrt{2^2 + 1^2}\, \mathrm{e}^{\mathrm{i}(\omega t + \varphi)} = \sqrt{5}\, \mathrm{e}^{\mathrm{i}(\omega t + \varphi)}$$

mit

$$\varphi = -\arctan \frac{1}{2} = -26^\circ\, 34' = 0{,}46 \text{ rad}.$$

Die resultierende Schwingung lautet somit

$$2{,}91 \cos (\omega t - 0{,}46).$$

*Differentialgleichung und unbestimmtes Integral der harmonischen Schwingung*

Durch Differentiation der komplexen Größe $\psi = \mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega t}$ ergibt sich

$$\frac{\mathrm{d}\psi}{\mathrm{d}t} = \mathrm{i}\omega \, \mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega t} = \mathrm{i}\omega\psi = \omega \, \mathrm{e}^{\mathrm{i}\frac{\pi}{2}}\psi. \tag{7}$$

Die erste Ableitung bedeutet danach in der Gaussschen Zahlenebene eine **Streckung** um den Faktor $\omega$ bei gleichzeitiger **Drehung** um $\frac{\pi}{2}$ (vgl. Bild 1.2.3). Zweimalige Anwendung dieser Operation führt auf

$$\frac{\mathrm{d}^2\psi}{\mathrm{d}t^2} = -\omega^2\psi. \tag{8}$$

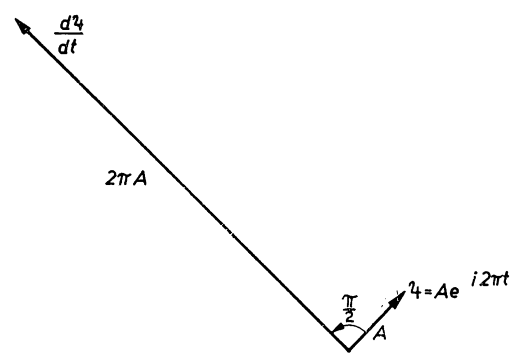



Bild 1.2.3. Differentiation als Drehstreckung in der Gaussschen Zahlenebene für $f = 1$ Hz

Somit erhält man als Differentialgleichung der ungedämpften harmonischen Schwingung

$$\boxed{\frac{\mathrm{d}^2\psi}{\mathrm{d}t^2} + \omega^2\psi = 0}. \tag{9}$$

Die unbestimmte Integration besteht in der Umkehrung der Operation (7):

$$\int \psi \,\mathrm{d}t = \frac{\psi}{\mathrm{i}\omega} = -\frac{\mathrm{i}}{\omega}\,\psi. \tag{10}$$

(vgl. Bild 1.2.4).

Bild 1.2.4. Integration in der Gaussschen Zahlenebene für $f = 1$ Hz

*Amplitude und Phasenverschiebung*

Die Phasenverschiebung einer Schwingung

$$\psi = \psi_0 \cos(\omega t + \delta) \qquad \text{bzw.} \qquad \psi = \psi_0 \sin\left(\omega t + \delta - \frac{\pi}{2}\right) \tag{11}$$

kann in der Amplitude zum Ausdruck gebracht werden. In komplexer Schreibweise ist

$$\psi = \psi_0\, \mathrm{e}^{\mathrm{i}\delta}\, \mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega t}. \tag{12}$$

Hierin lassen sich die ersten beiden Faktoren, die von der Zeit $t$ unabhängig sind, zu einer komplexen Größe zusammenfassen:

$$A = \psi_0 \, \mathrm{e}^{\mathrm{i}\delta}. \tag{13}$$

Im folgenden wird unter der Amplitude $A$ eine im allgemeinen komplexe Größe verstanden. Sie kann in speziellen Fällen, für $\delta = 0$ oder $\delta = \pi$, rein reell sein.

**Beispiel 1.2.2. Komplexe Amplitude**

Die periodische Funktion

$$\psi = (1 - \mathrm{i}) \, \mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega t} = \sqrt{2} \, \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\frac{\pi}{4}} \, \mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega t}$$

stellt eine Schwingung mit der Phasenverschiebung $\delta = -\frac{\pi}{4}$ und dem Betrag der Amplitude $|A| = \sqrt{2}$ dar.

*Multiplikation periodisch veränderlicher Größen*

Die komplexe Darstellung ist nur bei linearer Verknüpfung zwischen zeitlich periodischen Größen zulässig. Bei quadratischer Verknüpfung und daher auch bei Multiplikationen müssen die reellen Größen direkt verwendet werden.

**Beispiel 1.2.3. Energiedichte**

Die räumliche Energiedichte $w_\mathrm{e}$ des elektrischen Feldes ergibt sich gemäß

$$w_\mathrm{e} = \frac{1}{2} \boldsymbol{E} \cdot \boldsymbol{D} = \frac{1}{2} \varepsilon \boldsymbol{E}^2$$

(vgl. 1.3./11). Darin bedeutet $\boldsymbol{E}$ die elektrische Feldstärke, $\boldsymbol{D} = \varepsilon \boldsymbol{E}$ die elektrische Erregung bzw. Verschiebungsdichte (vgl. [4] 1.4.5./1). $E$ kennzeichnet die Dielektrizitätskonstante.
In einem periodisch veränderlichen Feld ist

$$\boldsymbol{E} = \boldsymbol{E}_0 \, \mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega t}, \qquad \boldsymbol{D} = \boldsymbol{D}_0 \, \mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega t}.$$

Die Energiedichte des elektrischen Feldes folgt durch Multiplikation der Real- oder der Imaginärteile. Ist die Zeitabhängigkeit so festgelegt, daß für $t = 0$ das elektrische und das Verschiebungsfeld verschwinden, so ergibt sich aus den Imaginärteilen von $\boldsymbol{E}$ und $\boldsymbol{D}$

$$\boldsymbol{E} = \boldsymbol{E}_0 \sin \omega t, \qquad \boldsymbol{D} = \boldsymbol{D}_0 \sin \omega t$$

und daher

$$w_\mathrm{e} = \frac{1}{2} \boldsymbol{E}_0 \cdot \boldsymbol{D}_0 \sin^2 \omega t.$$

Dagegen führt Multiplikation der Größen (12) nicht zum richtigen Ergebnis.

*Wellen*

In einem Wellenfeld treten in jedem Raumpunkt Schwingungen auf. Die Auslenkung $\psi$ aus der Gleichgewichtslage ist sowohl von den Lagekoordinaten als auch von der Zeit abhängig. Bezeichnet $\boldsymbol{r}$ den Ortsvektor, so gilt

$$\psi = \psi(\boldsymbol{r}, t). \tag{14}$$

Sind die Schwingungen harmonisch, so kann die zeitliche Abhängigkeit der Auslenkung durch den Faktor $e^{i\omega t}$ dargestellt werden. Anstelle von (14) erhält man dann

$$\psi = \psi_0(\boldsymbol{r})\,e^{i\omega t}. \tag{14a}$$

Auch der Faktor $e^{-i\omega t}$ kann zur Darstellung der zeitlichen Abhängigkeit verwendet werden.
Jede Welle enthält Punkte, in denen die Phase zu jedem Zeitpunkt übereinstimmt. Diese Punkte liegen auf Flächen, die als Flächen gleicher Phase bzw. **Phasenflächen** bezeichnet werden.

**Beispiel 1.2.4. Kugelwelle und ebene Welle**

Bei der allseitigen Ausstrahlung von einem Punkt in den freien Raum, z. B. bei der allseitigen Ausstrahlung eines Funksignals aus großer Höhe, liegen die Punkte gleicher Phase auf Kugeln. Die erzeugte Welle heißt Kugelwelle (vgl. Bild 1.2.5). Wählt man den Ausgangspunkt der Kugelwelle als Koordinatenanfangspunkt, so hängen die Phase und damit die Auslenkung $\psi$ nur von der Länge des Ortsvektors $\boldsymbol{r}$ und von der Zeit $t$ ab. Kugelwellen sind daher allgemein in der Form

$$\psi = \psi(r, t) \qquad \text{bzw.} \qquad \psi = \psi_0(r)\,e^{i\omega t} \tag{15}$$

darstellbar.
Bei ebenen Wellen sind die Flächen gleicher Phase Ebenen (vgl. Bild 1.2.6a). Die Ebenennormale kann als $z$-Achse gewählt werden, so daß die Phase nur von der Koordinate $z$ und von der Zeit $t$ abhängt:

$$\psi = \psi(z, t) \qquad \text{bzw.} \qquad \psi = \psi_0(z)\,e^{i\omega t}. \tag{16}$$

Ebene Wellen liegen bei parallelen Lichtstrahlen vor. Auch ein kleiner Ausschnitt aus einer Kugelwelle kann in hinreichender Entfernung vom Zentrum als eben behandelt werden (vgl. Bild 1.2.6b).

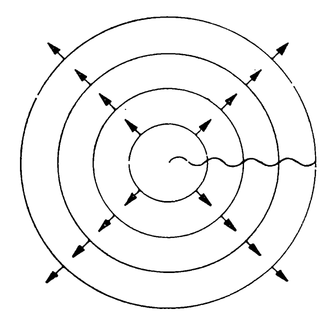


Bild 1.2.5. Kugelwelle

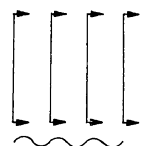


Bild 1.2.6a. Ebene Welle

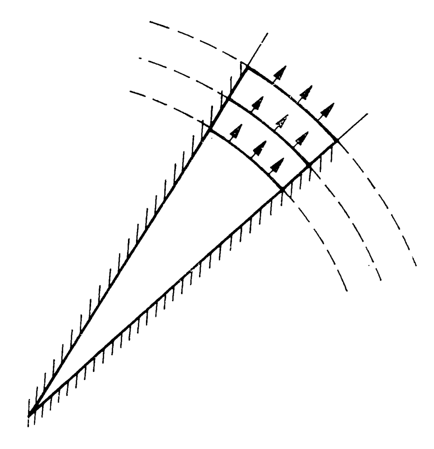


Bild 1.2.6b. Ebene Welle als Ausschnitt aus einer Kugelwelle

Wellen sind dadurch gekennzeichnet, daß ein bestimmter Schwingungszustand, z. B. der Wellenberg als Maximum der Auslenkung, im Raum fortschreitet. Dabei bewegt sich die konstante Phase von Phasenfläche zu Phasenfläche. Die Geschwindigkeit, mit der die Phase bei diesem Vorgang fortschreitet, heißt **Phasengeschwindigkeit**. Sie wird im allgemeinen mit $u$ bezeichnet.
Das Fortschreiten der Phase mit der Phasengeschwindigkeit $u$ erfolgt normal zu den Phasenflächen. Die Normalen der Phasenflächen kennzeichnen daher die **Strahlen**, längs derer sich ein bestimmter Schwingungszustand fortpflanzt.

*Darstellung der ebenen ungedämpften Welle*

In einer ebenen Welle, die sich mit der Phasengeschwindigkeit $u$ fortpflanzt, ist der Phasenzustand nicht nur eine periodische Funktion der Zeit, sondern auch der Lagekoordinate $z$. Der zu einem bestimmten Zeitpunkt bei $z = 0$ bestehende Phasenzustand wird an der Stelle $z$ nach der Zeit

$$t_0 = t_0(z, u) = \frac{z}{u} \tag{17}$$

erreicht. Der Schwingungszustand in einem Punkt $z$ zur Zeit $t$ kann daher bei ebenen ungedämpften Wellen gemäß

$$\psi = A\ \mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega(t-t_0)} \qquad \text{bzw.} \qquad \psi = A\ \mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega\left(t-\frac{z}{u}\right)} \tag{18}$$

dargestellt werden.
Der Phasenzustand einer ebenen Welle wiederholt sich längs $z$ periodisch. Eine Periode hat nach (18) die Länge

$$\lambda = \frac{2\pi}{\omega}\,u = \frac{u}{f}. \tag{19}$$

Diese Strecke heißt **Wellenlänge**. Zwischen der Wellenlänge $\lambda$, der Frequenz $f$ und der Phasengeschwindigkeit $u$ besteht nach (19) die Grundgleichung

$$\boxed{\lambda f = u}\,. \tag{20}$$

Bezeichnet $c$ die Ausbreitungsgeschwindigkeit in einem Bezugsmedium, z. B. für Vakuum bei Lichtwellen, so gibt

$$\boxed{n = \frac{c}{u}} \tag{21}$$

die Brechzahl des Mediums an. Sie ist im allgemeinen mehr oder weniger von der Wellenlänge abhängig (vgl. 1.4.). In anisotropen Medien hängt $n$ auch noch von der Ausbreitungsrichtung der Lichtwelle ab (vgl. 3.2.).
Die Größe

$$k = \frac{2\pi}{\lambda} = \frac{\omega}{u} = n\,\frac{\omega}{c} \tag{22}$$

heißt **Wellenzahl.** Sie gibt die Anzahl der Perioden bzw. Wellen auf einer Strecke der Länge $2\pi$ m an, gemessen in Ausbreitungsrichtung. $k$ hat die Maßeinheit $\text{m}^{-1}$.
Führt man die Wellenzahl anstelle der Phasengeschwindigkeit in (18) ein, so erhält man

$$\psi = A\ \mathrm{e}^{\mathrm{i}(\omega t - kz)}.$$

Vielfach ist über das Koordinatensystem so verfügt, daß die $z$-Achse nicht mit der Ausbreitungsrichtung der ebenen Welle identisch ist. In diesem Falle wird die Ausbreitungsrichtung durch die Richtungscosinus ($\cos\alpha$, $\cos\beta$, $\cos\gamma$) festgelegt. Zur Darstellung einer ebenen Welle, deren Ausbreitungsrichtung in einem $x$, $y$, $z$-Koordinatensystem beliebig liegen kann, wird der **Wellenzahlvektor $\boldsymbol{k}$** eingeführt. Seine Länge ist gleich der Wellenzahl $\frac{2\pi}{\lambda}$, seine Richtung die der fortschreitenden ebenen Welle:

$$\boldsymbol{k} = (k_x, k_y, k_z) = \frac{2\pi}{\lambda}(\cos\alpha, \cos\beta, \cos\gamma). \tag{23}$$

Führt man den Ortsvektor $\boldsymbol{r} = (x, y, z)$ ein, so erhält man als Gleichung der Ebenen gleicher Phase

$$\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r} = \text{const} \qquad \text{bzw.} \qquad \frac{2\pi}{\lambda}(x\cos\alpha + y\cos\beta + z\cos\gamma) = \text{const}.$$

Als Darstellung der ebenen ungedämpften Welle beliebiger Ausbreitungsrichtung folgt daher

$$\boxed{\psi = A\ \mathrm{e}^{\mathrm{i}(\omega t - \boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r})}} \tag{24}$$

bzw. in Cartesischen Koordinaten

$$\psi = A\ \mathrm{e}^{\mathrm{i}[\omega t - k(x\cos\alpha + y\cos\beta + z\cos\gamma)]}. \tag{25}$$

**Beispiel 1.2.5. Ebene ungedämpfte Welle**

Ein Bündel paralleler Strahlen wird durch eine ebene Welle dargestellt. Die Richtungscosinus der Strahlen im $x$, $y$, $z$-Koordinatensystem seien $\left(\frac{1}{2}\sqrt{2},\ -\frac{1}{2}\sqrt{2},\ 0\right)$, d. h., sie verlaufen parallel zur $x$, $y$-Ebene und schneiden die $x$-Achse unter 45°, die $y$-Achse unter 135°. Als Wellenlänge werde $\lambda = 0{,}5\ \mu\text{m}$ angenommen, als Frequenz $f = 6\cdot 10^{13}$ Hz. Für den Wellenzahlvektor erhält man

$$\boldsymbol{k} = \frac{2\pi}{0{,}5\cdot 10^{-6}}\left(\frac{1}{2}\sqrt{2},\ -\frac{1}{2}\sqrt{2},\ 0\right)\text{m}^{-1}.$$

Als Gleichung der ebenen Welle folgt

$$\psi = A\ \mathrm{e}^{\mathrm{i}(\omega t - \boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r})} = A\ \mathrm{e}^{\mathrm{i}2\pi\cdot 10^6[6\cdot 10^7 t - \sqrt{2}(x-y)]}.$$

*Wellengleichung*

Die zweite Ableitung der ebenen Welle $\psi$ in (24) nach der Zeit $t$ ergibt

$$\frac{\partial^2\psi}{\partial t^2} = -\omega^2\psi. \tag{26}$$

Durch räumliche Ableitung erhält man

$$\operatorname{grad} \psi = \frac{\partial \psi}{\partial \boldsymbol{r}} = -\mathrm{i}\psi \boldsymbol{k}, \tag{27}$$

$$\Delta\psi = \operatorname{div} \operatorname{grad} \psi = -k^2\psi = -\frac{\omega^2}{u^2}\,\psi. \tag{28}$$

Aus dem Vergleich von (26) und (28) folgt die Wellengleichung

$$\boxed{\Delta\psi - \frac{1}{u^2}\frac{\partial^2\psi}{\partial t^2} = 0}\,. \tag{29}$$

Ihre Gültigkeit ist nicht nur auf ebene Wellen beschränkt. Wie sich beweisen läßt, kann jede Welle mit beliebig gekrümmten Phasenflächen durch Überlagerung ebener Wellen erzeugt werden. Auf Grund dessen besitzt (29) Gültigkeit für alle Wellen.

*Polarisation*

Die Schwingung

$$x = r_1\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega t}, \qquad y = r_2\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega t}, \tag{30}$$

wobei $r_1$ und $r_2$ reelle Zahlen sind, wird in der $x, y$-Ebene durch eine Gerade dargestellt. Eine Schwingung der Form (30) heißt daher linear polarisiert. Dagegen stellt die allgemeine Form der Schwingung

$$x = r_1\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega t}, \qquad y = r_2\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}(\omega t + \delta)} \qquad (\delta \neq 0, \pm\pi, \pm 2\pi, \ldots) \tag{31}$$

in der $x, y$-Ebene eine Ellipse dar und heißt daher elliptisch polarisiert. Im Spezialfall

$$r_1 = r_2, \qquad \delta = \pm\frac{\pi}{2} \tag{32}$$

ergibt sich eine zirkular polarisierte Schwingung.

**P** **Probleme**

### 1.2.1. Zirkular und linear polarisierte Schwingungen

Eine rechts- und eine linkszirkulare Schwingung gleicher Amplitude und gleicher Frequenz werden überlagert. Zwischen beiden Schwingungen besteht die Phasenverschiebung $\delta = \frac{\pi}{3}$. Bestimmen Sie die resultierende Schwingung (vgl. Bild 1.2.7).

**Lösung:**

Die linksdrehend zirkular polarisierte Schwingung ist durch

$$x_1 = \cos\omega t, \qquad y_1 = \sin\omega t, \tag{1}$$

die rechtsdrehende, dagegen phasenverschobene, durch

$$x_2 = \cos(-\omega t + \delta) = \cos(\omega t - \delta), \qquad y_2 = -\sin(\omega t - \delta) \tag{2}$$

gegeben. Wir verlegen diese Schwingungen in die komplexe Zahlenebene $z = x + \mathrm{i}y$ und schreiben

$$z_1 = x_1 + \mathrm{i}y_1 = \mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega t} \tag{3}$$

$$z_2 = x_2 + \mathrm{i}y_2 = \mathrm{e}^{-\mathrm{i}(\omega t - \delta)}. \tag{4}$$

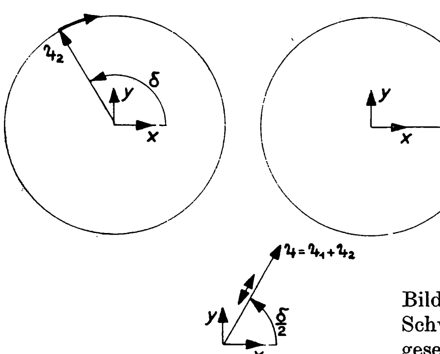



Bild 1.2.7. Addition zweier zirkularer Schwingungen mit zueinander entgegengesetztem Drehsinn

Als Summe ergibt sich

$$z = z_1 + z_2 = \mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega t} + \mathrm{e}^{-\mathrm{i}(\omega t - \delta)} = \mathrm{e}^{\mathrm{i}\frac{\delta}{2}}\left(\mathrm{e}^{\mathrm{i}\left(\omega t - \frac{\delta}{2}\right)} + \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\left(\omega t - \frac{\delta}{2}\right)}\right),$$

d. h.,

$$z = 2\mathrm{e}^{\mathrm{i}\frac{\delta}{2}} \cos\left(\omega t - \frac{\delta}{2}\right). \tag{5}$$

Man erhält somit

$$x = 2\cos\frac{\delta}{2}\cos\left(\omega t - \frac{\delta}{2}\right), \qquad y = 2\sin\frac{\delta}{2}\cos\left(\omega t - \frac{\delta}{2}\right), \tag{6}$$

d.h.,

$$y = \tan\frac{\delta}{2}\,x. \tag{7}$$

(5) und (6) stellen hiernach eine linear polarisierte Schwingung dar. Die Schwingungsrichtung bildet mit der $x$-Achse den Winkel $\frac{\delta}{2}$, im vorliegenden Fall also 30°.

## 1.2.2. Linear und elliptisch polarisierte Schwingungen

Die Schwingung eines Vektors sei in Richtung der $x$-Achse durch die Komponente

$$x = r_1 \cos\omega t \tag{1}$$

gegeben. In Richtung der $y$-Achse eilt die Schwingung um den Phasenwinkel $\delta$ voraus, so daß

$$y = r_2 \cos(\omega t + \delta) \tag{2}$$

gilt. Untersuchen Sie, unter welchen Bedingungen die Schwingung linear und unter welchen sie zirkular polarisiert ist. Bestimmen Sie die Lage und die Parameter der Schwingungskurve. Berechnen Sie speziell den Fall $r_1 = 1$, $r_2 = 2$, $\delta = 30°$ (vgl. Bild 1.2.8).

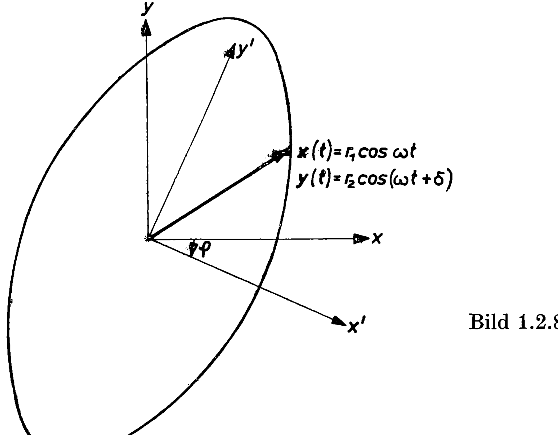



Bild 1.2.8. Schwingungsellipse

**Lösung:**

Wir wenden aus der analytischen Geometrie die Gleichungen zur Klassifikation einer Kurve zweiter Ordnung an. Die Cosinusfunktion schwankt zwischen $-1$ und $+1$. Daher kommen als Schwingungskurven nur Ellipsen, Kreise und Strecken in Frage.
Die allgemeine Gleichung der Kurven zweiter Ordnung lautet [8]

$$a_1x^2 + 2a_2xy + a_3y^2 + a_4x + a_5y + a_6 = 0. \tag{3}$$

Durch Verschieben des Koordinatenursprungs in den Kurvenmittelpunkt mit den Koordinaten

$$x_0 = \frac{a_2a_5 - a_3a_4}{\Delta}, \qquad y_0 = \frac{a_2a_4 - a_1a_5}{\Delta} \tag{4}$$

und Drehung um den Winkel $\varphi$ mit

$$\tan 2\varphi = \frac{2a_2}{a_1 - a_3} \tag{5}$$

entsteht die Normalform der Gleichung

$$a'x'^2 + c'y'^2 + \frac{\Delta_0}{\Delta} = 0 \tag{6}$$

(vgl. Bild 1.2.8). In (6) ist

$$a' = \frac{a_1 + a_3 + \sqrt{(a_1 - a_3)^2 + 4a_2{}^2}}{2}, \tag{7}$$

$$c' = \frac{a_1 + a_3 - \sqrt{(a_1 - a_3)^2 + 4a_2{}^2}}{2}, \tag{8}$$

$$\Delta_0 = \begin{vmatrix} a_1 & a_2 & a_4 \\ a_2 & a_3 & a_5 \\ a_4 & a_5 & a_6 \end{vmatrix}, \qquad \Delta = a_1a_3 - a_2{}^2. \tag{9}$$

Das Vorzeichen von $2a_2$ muß mit dem Vorzeichen von $\sin 2\varphi$ übereinstimmen.
Im vorliegenden Fall können wir nach (1) und (2) schreiben

$$y = r_2 (\cos \omega t \cos \delta - \sin \omega t \sin \delta) = \frac{r_2}{r_1} x \cos \delta - \sqrt{r_2^2 - \frac{r_2^2}{r_1^2} x^2} \sin \delta . \tag{10}$$

Durch Umformen und Quadrieren entsteht

$$r_2^2 x^2 - 2 r_1 r_2 x y \cos \delta + r_1^2 y^2 - r_1^2 r_2^2 \sin^2 \delta = 0 . \tag{11}$$

Wir erhalten somit gemäß (3)

$$a_1 = r_2^2, \qquad a_2 = -r_1 r_2 \cos \delta, \qquad a_3 = r_1^2,$$
$$a_4 = 0, \qquad a_5 = 0, \qquad a_6 = -r_1^2 r_2^2 \sin^2 \delta .$$

Wie aus (4) hervorgeht, fällt der Koordinatenanfangspunkt auf den Kurvenmittelpunkt:

$$x_0 = 0, \qquad y_0 = 0 . \tag{12}$$

Für den Drehwinkel $\varphi$ folgt nach (5)

$$\tan 2\varphi = -\frac{2 r_1 r_2 \cos \delta}{r_2^2 - r_1^2} . \tag{13}$$

Damit ergibt sich nach (6) bis (8) für die Normalform (1)

$$a' = \frac{r_1^2 + r_2^2 + \sqrt{(r_2^2 - r_1^2)^2 + 4 r_1^2 r_2^2 \cos^2 \delta}}{2} , \tag{14a}$$

$$c' = \frac{r_1^2 + r_2^2 - \sqrt{(r_2^2 - r_1^2)^2 + 4 r_1^2 r_2^2 \cos^2 \delta}}{2} , \tag{14b}$$

$$\frac{\Delta_0}{\Delta} = -r_1^2 r_2^2 \sin^2 \delta . \tag{15}$$

Eine zirkular polarisierte Schwingung liegt für $a' = c'$, d. h. für

$$r_1 = r_2, \qquad \delta = \pm \frac{\pi}{2} , \tag{16}$$

vor. Dagegen erhält man eine linear polarisierte für $c' = 0$, d. h. für

$$\delta = 0, \pi . \tag{17}$$

Im vorliegenden Fall ist wegen $\cos 30° = 0{,}866$

$$\tan 2\varphi = -\frac{2 \cdot 2 \cdot 1 \cdot 0{,}866}{4 - 1} = -1{,}155, \qquad \varphi = -24{,}5°;$$

$$a' = 4{,}44, \qquad c' = 0{,}563 .$$

Die Länge der Halbachsen wird durch

$$\frac{1}{\sqrt{a'}} = 0{,}48, \qquad \frac{1}{\sqrt{c'}} = 1{,}33$$

festgelegt.

### 1.2.3. Kugelwelle

Von einem Punkt im Raum wird allseitig eine harmonische Welle ausgestrahlt. Stellen Sie diese als Lösung der Wellengleichung dar.
Welche Funktion ergibt sich für eine in den Koordinatenanfangspunkt mit der Geschwindigkeit $u = c = 3 \cdot 10^8$ m s$^{-1}$ einlaufende (konvergierende) Welle? Die Frequenz sei $3 \cdot 10^{15}$ Hz.

**Lösung:**

Wir führen Kugelkoordinaten $r$, $\vartheta$, $\varphi$ ein und wählen den Ursprungspunkt der auslaufenden Welle als Koordinatenanfangspunkt. Da keine Abhängigkeit von den Polarwinkeln $\delta$ und $\varphi$ besteht, können wir schreiben

$$\operatorname{grad} \psi(r) = \frac{\partial \psi}{\partial r} \frac{\boldsymbol{r}}{r}, \tag{1}$$

$$\triangle \psi = \operatorname{div} \operatorname{grad} \psi(r) = \frac{1}{r} \frac{\partial \psi}{\partial r} \operatorname{div} \boldsymbol{r} + \frac{r^2}{r} \left( \frac{1}{r} \frac{\partial^2 \psi}{\partial r^2} - \frac{1}{r^2} \frac{\partial \psi}{\partial r} \right). \tag{2}$$

Berücksichtigen wir $\operatorname{div} \boldsymbol{r} = 3$, so folgt

$$\triangle \psi = \frac{\partial^2 \psi}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial \psi}{\partial r}. \tag{3}$$

Die Wellengleichung (1.2./29) geht damit in

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial \psi}{\partial r} - \frac{1}{u^2} \frac{\partial^2 \psi}{\partial t^2} = 0 \tag{4}$$

über. Hierfür schreiben wir

$$\frac{1}{r} \frac{\partial^2 (r\psi)}{\partial r^2} - \frac{1}{u^2} \frac{\partial^2 (r\psi)}{\partial t^2} = 0. \tag{5}$$

Als Lösung dieser Gleichung erhält man

$$r\psi = A f\left(t \mp \frac{r}{u}\right). \tag{6}$$

Darin bedeutet $A$ eine Konstante. Wir betrachten den Spezialfall harmonischer Schwingungen, schreiben also (6) in der Form

$$\psi = \frac{A}{r} \mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega\left(t \mp \frac{r}{u}\right)}. \tag{7}$$

Die Amplitude der Welle ist gleich $\frac{A}{r}$ und damit umgekehrt proportional dem Abstand $r$ vom Ursprungspunkt. Allgemein ist die Energiestromdichte des Strahlungsfeldes bei jeder Welle proportional der Amplitude: Bei der Kugelwelle nimmt die Energiestromdichte proportional $\frac{1}{r^2}$ ab.

Nach (7) erhält man für die Flächen gleicher Phase

$$\omega\left(t \mp \frac{u}{r}\right) = \text{const}. \tag{8}$$

Bei festgelegter Zeit $t$ ist somit die Phase nur vom Abstand $r$ abhängig; d. h., als Flächen gleicher Phase ergeben sich Kugeln, deren Mittelpunkt mit dem Koordinatenanfangspunkt zusammenfällt.
Die Geschwindigkeit, mit der ein konstanter Phasenwert im Raum fortschreitet, folgt durch Differenzieren nach der Zeit $t$:

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\,\omega\left[t \mp \frac{r(t)}{u}\right] = 0 \qquad \text{bzw.} \qquad \frac{\mathrm{d}r}{\mathrm{d}t} = \pm u\,. \tag{9}$$

Die Kugelwelle

$$\psi = \frac{A}{r}\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega\left(t-\frac{r}{u}\right)} \qquad \text{bzw.} \qquad \psi = \frac{A}{r}\,f_1\left(t - \frac{r}{u}\right) \tag{10}$$

stellt somit eine auslaufende Welle dar, deren Phasenzustände mit der Geschwindigkeit

$$\frac{\mathrm{d}r}{\mathrm{d}t} = u > 0 \tag{11}$$

vom Zentrum der Erregung fortschreiten.
Dagegen wird durch

$$\psi = \frac{B}{r}\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega\left(t+\frac{r}{u}\right)} \qquad \text{bzw.} \qquad \psi = \frac{B}{r}\,f_2\left(t + \frac{r}{u}\right) \tag{12}$$

wegen

$$\frac{\mathrm{d}r}{\mathrm{d}t} = -u < 0 \tag{13}$$

eine in das Erregungszentrum einlaufende Welle dargestellt. Die allgemeine Lösung der Wellengleichung als Differentialgleichung zweiter Ordnung muß zwei Konstanten enthalten, kann also in der Form

$$\psi = \frac{A}{r}\,f_1\left(t - \frac{r}{u}\right) + \frac{B}{r}\,f_2\left(t + \frac{r}{u}\right) \tag{14}$$

geschrieben werden.
Mit den vorgegebenen Werten lautet die Darstellung der einlaufenden Welle

$$\psi = \frac{A}{r}\exp\mathrm{i}\left[2\pi\cdot 3\cdot 10^{15}\,\mathrm{s}^{-1}\left(t + \frac{r}{3\cdot 10^{8}\,\mathrm{m\,s}^{-1}}\right)\right].$$

### 1.2.4. Signalgeschwindigkeit

Die ungedämpfte harmonische Schwingung enthält noch keine Information. Um mit einer Welle eine Information zu übertragen, ist es erforderlich, auf die Trägerwelle eine Störung zu überlagern. Diese Überlagerung kann auch eine zweite Welle sein.
Es seien zwei Wellen überlagert, die die gleiche Amplitude $A = A_1$ und die gleiche Ausbreitungsrichtung haben, deren Kreisfrequenzen $\omega$ und $\omega_1$ sowie Phasengeschwindigkeiten $u$ und $u_1$ jedoch voneinander abweichen:

$$\psi = A\cos\omega\left(t - \frac{z}{u}\right) + A\cos\omega_1\left(t - \frac{z}{u_1}\right). \tag{1}$$

Die Unterschiede seien nur geringfügig, so daß man unter Vernachlässigung der Glieder höherer Ordnung schreiben kann

$$\omega_1 = \omega + \Delta\omega, \tag{2}$$

$$u_1 = u + \frac{du}{d\omega}\Delta\omega. \tag{3}$$

Untersuchen Sie die als Überlagerung sich ergebende Schwebung und bestimmen Sie die Geschwindigkeit, mit der die durch die Schwebung gegebene Information im Raum übertragen wird.
Berechnen Sie speziell die Signalgeschwindigkeit in Wasser für Licht der Wellenlänge $\lambda = 656{,}28$ nm. Hierfür beträgt die Brechzahl $n = 1{,}331\,84$. Dagegen ist für $\lambda = 589{,}62$ nm $n = 1{,}333\,69$.

**Lösung:**

Nach den Additionstheoremen der trigonometrischen Funktionen besteht die Beziehung

$$\cos\varphi + \cos\varphi_1 = 2\cos\frac{\varphi_1 + \varphi}{2}\cos\frac{\varphi_1 - \varphi}{2}. \tag{4}$$

Anstelle von (1) können wir daher schreiben

$$\psi = 2A\cos\left[\frac{\omega_1}{2}\left(t - \frac{z}{u_1}\right) + \frac{\omega}{2}\left(t - \frac{z}{u}\right)\right]\cos\left[\frac{\omega_1}{2}\left(t - \frac{z}{u_1}\right) - \frac{\omega}{2}\left(t - \frac{z}{u}\right)\right]. \tag{5}$$

Im Argument des ersten Cosinusfaktors, bei der Addition annähernd gleicher Ausdrücke, ist der Unterschied zwischen $\omega$ und $\omega_1$ sowie zwischen $u$ und $u_1$ zu vernachlässigen. Bei der Berechnung der Differenzen im Argument des zweiten Cosinusfaktors ist dieser Unterschied jedoch von Bedeutung. Wir erhalten hier bei Vernachlässigung der Glieder zweiter Ordnung aus (2) und (3)

$$\frac{\Delta\omega}{2}t - \frac{z}{2}\left(\frac{\omega_1}{u_1} - \frac{\omega}{u}\right) = \frac{\Delta\omega}{2}t - \frac{z}{2}\left(\frac{1}{u} - \frac{\omega}{u^2}\frac{du}{d\omega}\right)\Delta\omega. \tag{6}$$

Damit folgt aus (5)

$$\psi = 2A\cos\omega\left(t - \frac{z}{u}\right)\cos\frac{\Delta\omega}{2}\left(t - \frac{z}{v}\right) \tag{7}$$

mit

$$v = \frac{1}{\dfrac{1}{u} - \dfrac{\omega}{u^2}\dfrac{du}{d\omega}}. \tag{8}$$

Der Faktor $\cos\omega\left(t - \frac{z}{u}\right)$ in (7) kennzeichnet die hochfrequente Trägerwelle. Dagegen charakterisiert $\cos\frac{\Delta\omega}{2}\left(t - \frac{z}{v}\right)$ die Schwebung, d. h. die zeitlich langsame Veränderung der Amplitude. Diese Schwebung kennzeichnet die mit der Welle übertragene Information.
Die Schwebung breitet sich mit einer von der Phasengeschwindigkeit $u$ abweichenden Signalgeschwindigkeit $v$ aus; $v$ wird auch als Informations- oder Gruppengeschwindigkeit bezeichnet.
Die Beziehung (8) für die Signalgeschwindigkeit läßt sich vereinfachen. Wir berücksichtigen die Definitionsgleichung für die Wellenzahl $k$ nach (1.2./22) und differenzieren nach der Kreis-

frequenz $\omega$. Es folgt

$$\frac{\mathrm{d}k}{\mathrm{d}\omega} = \frac{\mathrm{d}\frac{\omega}{u}}{\mathrm{d}\omega} = \frac{1}{u} - \frac{\omega}{u^2}\frac{\mathrm{d}u}{\mathrm{d}\omega}. \tag{9}$$

Anstelle von (8) können wir daher für die Signalgeschwindigkeit $v$

$$\boxed{v = \frac{\mathrm{d}\omega}{\mathrm{d}k}} \tag{10}$$

schreiben.
Im vorliegenden Fall benutzen wir anstelle von (10)

$$v = \frac{\mathrm{d}\omega}{\mathrm{d}k} = \frac{\mathrm{d}f}{\mathrm{d}\frac{1}{\lambda}} \tag{11}$$

und berücksichtigen, daß die Frequenz nach (1.2./21) durch

$$f = \frac{c}{n(\lambda)}\frac{1}{\lambda} \tag{12}$$

gegeben ist. Damit erhält man

$$v = \frac{c}{n} + \frac{c}{\lambda}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\frac{1}{\lambda}}\frac{1}{n}$$

bzw.

$$v = \frac{c}{n}\left(1 + \frac{\lambda}{n}\frac{\mathrm{d}n}{\mathrm{d}\lambda}\right). \tag{13}$$

Zur numerischen Berechnung der Signalgeschwindigkeit ersetzen wir die Differentiale $\mathrm{d}n$ bzw. $\mathrm{d}\lambda$ durch Differenzen $\Delta n$ bzw. $\Delta\lambda$ und erhalten mit den vorgegebenen Werten

$$v = \frac{3 \cdot 10^8}{1{,}331\,84}\left(1 - \frac{656{,}28 \cdot 10^{-9}}{1{,}331\,84}\,\frac{0{,}001\,85}{66{,}66 \cdot 10^{-9}}\right)\mathrm{m\,s^{-1}} = 2{,}22 \cdot 10^8\,\mathrm{m\,s^{-1}}.$$



## Aufgaben

A 1.2.1. Ein Vektor schwingt in der $x, y$-Ebene unter dem Winkel 45° gegen die $x$-Achse. Diese Schwingung kann in die beiden Komponenten in Richtung der $x$- und in Richtung der $y$-Achse zerlegt werden. Durch eine äußere Störung wird zwischen den beiden Komponenten eine Phasenverschiebung $\delta = 30°$ hervorgerufen. Bestimmen Sie die Lage der entstehenden Schwingungsellipse in der $x, y$-Ebene und ihre numerische Exzentrizität.

A 1.2.2. Wie groß muß die Phasenverschiebung bei der Überlagerung zweier entgegengesetzt rotierender zirkular polarisierter Schwingungen sein, wenn sich eine linear polarisierte Schwingung unter 45° gegen die $x$- und gegen die $y$-Achse ergeben soll?

A 1.2.3. Es werden die beiden Schwingungen $\sin \omega t$ und $2 \sin\left(\omega t - \frac{\pi}{3}\right)$ überlagert. Bestimmen Sie grafisch die resultierende Schwingung.

A 1.2.4. Stellen Sie eine linkselliptische und eine rechtselliptische Schwingung dar, wenn die Koordinatenachsen mit den Halbachsen der Schwingungsellipse zusammenfallen.

A 1.2.5. Leiten Sie aus der Wellengleichung die Differentialgleichung der Wellen ab, als deren Phasenflächen sich Kreiszylinder ergeben. Bestimmen Sie die Lösungsfunktionen.

A 1.2.6. Bei den DE-BROGLIEschen Wellen freier Elektronen besteht zwischen Phasen- und Gruppengeschwindigkeit die Beziehung $uv = c^2$. Welche Ungleichung ergibt sich daraus für die Phasengeschwindigkeit $u$, wenn man berücksichtigt, daß die Gruppengeschwindigkeit mit der Geschwindigkeit des Teilchens identisch ist?

A 1.2.7. Stellen Sie die Wellengleichung für den zweidimensionalen räumlichen Fall auf und schreiben Sie die Lösung als Überlagerung von Kugelwellen nieder. Ist eine einfache Lösung der Gestalt

$$\psi = \frac{1}{r} f\left(\frac{r}{u} \mp t\right)$$

möglich?

A 1.2.8. Es wird gefordert, daß die Signalgeschwindigkeit proportional $\frac{1}{u}$ sein soll. Bestimmen Sie die Abhängigkeit der Brechzahl von der Frequenz.

A 1.2.9. Ein Elektron im elektrischen Feld wird durch ein Strahlungsfeld um $\boldsymbol{X}$ aus seiner Ruhelage ausgelenkt. Die rücktreibende Kraft sei $\boldsymbol{F}_\mathrm{r} = -k\boldsymbol{X}$. Stellen Sie die Bewegungsgleichung auf und untersuchen Sie die Bewegung unter der Voraussetzung, daß die Elektronenmasse konstant ist.

A 1.2.10. Auf ein Elektron im elektrischen Feld wirkt als harmonische Störung eine äußere Kraft $\boldsymbol{F}_\mathrm{a}$ mit der Amplitude $c$ und der Kreisfrequenz $\omega$ ein. Stellen Sie die Differentialgleichung des Bewegungsvorganges auf und bestimmen Sie die allgemeine Lösung.

A 1.2.11. Welche relative Abweichung der Signalgeschwindigkeit von der Phasengeschwindigkeit $c/n$ bedingt die spezifische Änderung der Brechzahl mit der Wellenlänge von der Größe $2 \cdot 10^4\ \mathrm{m}^{-1}$ bei Licht der Wellenlänge 600 nm für $n = 1{,}6$?

A 1.2.12. Zwischen 400 nm und 800 nm ändert sich die Brechzahl von 1,85 auf 1,75. Welche mittlere Abweichung der Signal- von der Phasengeschwindigkeit folgt daraus für den sichtbaren Bereich?

## 1.3. Elektromagnetische Theorie des Lichtes

### E Einführung

*Maxwellsche Theorie des elektromagnetischen Feldes*

Die elektromagnetische Theorie des Lichtes deutet dieses als transversale elektromagnetische Welle. Durch die Theorie werden insbesondere die Gesetze der **Ausbreitung des Lichtes** erklärt. Dagegen versagt sie bei der Emission und Absorption. Diese Erscheinungen beruhen auf der Wechselwirkung zwischen den Atomen oder Molekülen und dem auslösenden Feld. Sie finden ihre Deutung durch die Quantentheorie.

Theoretisch begründet wurde die **Wellentheorie** des Lichtes im Jahre 1864 durch MAXWELL. Ihre experimentelle Bestätigung fand sie durch die Versuche von H. HERTZ im Jahre 1887.

Zur Beschreibung des elektromagnetischen Feldes (vgl. [4]) werden die elektrischen Größen $\boldsymbol{E}$ und $\boldsymbol{D}$ sowie die magnetischen Größen $\boldsymbol{H}$ und $\boldsymbol{B}$ eingeführt.
$\boldsymbol{E}$ gibt die elektrische Feldstärke an und wird in V $m^{-1}$ gemessen. $\boldsymbol{D}$ kennzeichnet die elektrische Erregung des Raumes bzw. die dielektrische Verschiebungsdichte. Sie wird in A s $m^{-2}$ angegeben. Zwischen beiden Größen besteht die Beziehung

$$\boldsymbol{D} = \varepsilon \boldsymbol{E}. \tag{1}$$

Die Größe

$$\varepsilon = \varepsilon_r \varepsilon_0 \tag{2}$$

heißt Dielektrizitätskonstante. Sie ist materialabhängig und im allgemeinen mit der Frequenz des Lichtes veränderlich. $\varepsilon_r$ wird als Dielektrizitätszahl bzw. als relative Dielektrizitätskonstante bezeichnet. Sie gibt die Dielektrizitätskonstante im Vergleich zum Vakuum an, dessen Dielektrizität durch die elektrische Feldkonstante

$$\varepsilon_0 = 8{,}8542 \cdot 10^{-12}\ \mathrm{A\,s\,V^{-1}\,m^{-1}} \tag{3a}$$

bestimmt ist.
Die magnetische Feldstärke $\boldsymbol{H}$ wird in A $m^{-1}$ gemessen, die magnetische Flußdichte oder Induktion $\boldsymbol{B}$ in V s $m^{-2}$. Zwischen beiden Größen besteht die materialabhängige Beziehung

$$\boldsymbol{B} = \mu \boldsymbol{H}. \tag{4}$$

Darin gibt

$$\mu = \mu_r \mu_0 \tag{5}$$

die magnetische Permeabilität an, $\mu_r$ ist die Permeabilitätszahl bzw. relative Permeabilität. Für Vakuum ist $\mu_r = 1$, und die magnetische Permeabilität ist durch die magnetische Feldkonstante

$$\mu_0 = 1{,}2566 \cdot 10^{-6}\ \mathrm{V\,s\,A^{-1}\,m^{-1}} \tag{3b}$$

gegeben.
Die elektrische Stromdichte wird durch die Größe $\boldsymbol{J}$ gekennzeichnet und hat die Maßeinheit A $m^{-2}$. Sie ist mit dem elektrischen Feld durch das Ohmsche Gesetz

$$\boldsymbol{J} = \gamma \boldsymbol{E} \tag{6}$$

verknüpft. $\gamma$ ist eine material- und frequenzabhängige Größe, die die elektrische Leitfähigkeit, gemessen in $\Omega^{-1}$ $m^{-1}$, angibt.
Die Dichte der elektrischen Raumladung wird durch $\varrho$ gekennzeichnet. Sie hat die Maßeinheit A s $m^{-3}$.
Die eingeführten Größen sind durch die **Maxwellschen Gleichungen**

$$\dot{\boldsymbol{D}} + \boldsymbol{J} = \operatorname{rot} \boldsymbol{H}, \tag{7}$$

$$\dot{\boldsymbol{B}} = -\operatorname{rot} \boldsymbol{E}, \tag{8}$$

$$\operatorname{div} \boldsymbol{D} = \varrho, \tag{9}$$

$$\operatorname{div} \boldsymbol{B} = 0 \tag{10}$$

miteinander verknüpft (s. [4] 1.4.).

*Energieströmung und Poyntingscher Vektor*

Aus den MAXWELLschen Gleichungen läßt sich der Energieerhaltungssatz in der Form

$$\boldsymbol{E} \cdot \dot{\boldsymbol{D}} + \boldsymbol{H} \cdot \dot{\boldsymbol{B}} + \boldsymbol{E} \cdot \boldsymbol{J} + \operatorname{div} \boldsymbol{S} = 0 \tag{11}$$

ableiten. Darin haben die einzelnen Summanden die Maßeinheit J $s^{-1}$ $m^{-3}$, charakterisieren also zeitliche Änderungen von Energiedichten. $\boldsymbol{E} \cdot \dot{\boldsymbol{D}}$ gibt die Änderung der Energiedichte des elektrischen, $\boldsymbol{H} \cdot \dot{\boldsymbol{B}}$ des magnetischen Feldes an. $\boldsymbol{E} \cdot \boldsymbol{J}$ kennzeichnet die Wärmeleistung des Feldes. Für optische Untersuchungen ist besonders der **Poyntingsche Vektor**

$$\boldsymbol{S} = \boldsymbol{E} \times \boldsymbol{H} \tag{12}$$

von Bedeutung. Er hat die Maßeinheit W $m^{-2}$ und gibt die **Strahlungsflußdichte**, d. h. die infolge der Ausstrahlung fließende Energie, bezogen auf die Flächen- und Zeiteinheiten, an. (12) wird auch als POYNTINGscher Satz bezeichnet. Da $\boldsymbol{H}$ und $\boldsymbol{E}$ zueinander proportional sind, ist der zeitliche Mittelwert des Energieflusses, d. h. die Intensität des Strahlungsfeldes, proportional dem Quadrat der Amplitude (vgl. 1.3.1.).

*Gültigkeitsbereich der Theorie*

Die Materialkonstanten $\varepsilon$ und $\gamma$ sind frequenzabhängig:

$$\varepsilon = \varepsilon(\omega), \qquad \gamma = \gamma(\omega). \tag{13}$$

Bei den weitaus meisten Stoffen weicht die magnetische Permeabilität von der magnetischen Feldkonstanten relativ um weniger als $10^{-4}$ ab. Ferromagnetische Stoffe mit großen Permeabilitätszahlen $\mu_r$ zeigen stets auch eine große Absorption. Im allgemeinen kann man daher stets mit $\mu = \mu_0$ rechnen.
Für langsam veränderliche Felder bis etwa zum langwelligen Infrarot ($\lambda = 5\,\mu$m) können für $\varepsilon$ und $\gamma$ die Werte des elektrostatischen Feldes gesetzt werden. Erst bei kürzeren Wellen, im kurzwelligen Infrarot, im sichtbaren Bereich und im Ultraviolett, zeigt sich — für jedes Medium unterschiedlich — eine mehr oder weniger starke Abhängigkeit von der Frequenz.
Für absorbierende und hauptsächlich für metallische Medien hat die MAXWELLsche Theorie im sichtbaren und im ultravioletten Bereich nur qualitative Bedeutung. Sie ist hier als Limestheorie anzusehen. Dagegen zeigt sich im infraroten Bereich gute Übereinstimmung mit den Meßwerten.

*Wellengleichung*

In nichtabsorbierenden Medien ist $\gamma = 0$ und daher $J = 0$. Aus der ersten und dritten MAXWELLschen Gleichung folgt wegen div rot $\boldsymbol{H} = 0$

$$\dot{\varrho} = \operatorname{div} \dot{\boldsymbol{D}} = -\operatorname{div} \boldsymbol{J} = 0. \tag{9a}$$

Die Ladungsdichte ist in einem Isolator zeitlich konstant. Eine räumliche Ladungsdichte $\varrho$ führt zu einem statischen Feld, das sich auf das zeitlich veränderliche Feld der Lichtwelle überlagert, ohne diese zu beeinflussen. Im folgenden wird daher bei Isolatoren mit

$$\varrho = 0 \tag{9b}$$

gerechnet. Die Allgemeingültigkeit der Betrachtung wird damit nicht eingeschränkt. Führt man in der ersten MAXWELLschen Gleichung (7) gemäß (1) $\boldsymbol{E}$ anstelle von $\boldsymbol{D}$, in der zweiten gemäß (3) $\boldsymbol{H}$ anstelle von $\boldsymbol{B}$ ein, so entsteht

$$\varepsilon \dot{\boldsymbol{E}} = \operatorname{rot} \boldsymbol{H}, \tag{14}$$

$$\mu \dot{\boldsymbol{H}} = -\operatorname{rot} \boldsymbol{E}. \tag{15}$$

Die erste dieser beiden Gleichungen wird mit $\mu$ multipliziert und nach der Zeit differenziert. Auf die zweite Gleichung wird die Operation rot angewandt. Durch Vergleich läßt sich $\boldsymbol{H}$ eliminieren, und es entsteht

$$\varepsilon\mu \ddot{\boldsymbol{E}} = -\operatorname{rot} \operatorname{rot} \boldsymbol{E}. \tag{16}$$

Auf der rechten Seite kann die Vektorbeziehung

$$\operatorname{rot} \operatorname{rot} \boldsymbol{E} = \operatorname{grad} \operatorname{div} \boldsymbol{E} - \Delta \boldsymbol{E} \tag{17}$$

angewendet werden. Da nach (9b) $\operatorname{div} \boldsymbol{E} = 0$ ist, ergibt sich aus (16) und (17) die Wellengleichung des elektrischen Feldes

$$\boxed{\Delta \boldsymbol{E} - \varepsilon\mu \ddot{\boldsymbol{E}} = 0}\,. \tag{18}$$

Ebenso folgt aus (14) und (15) durch Elimination von $\boldsymbol{E}$ die Wellengleichung für das magnetische Feld

$$\Delta \boldsymbol{H} - \varepsilon\mu \ddot{\boldsymbol{H}} = 0. \tag{19}$$

Die Lösung der Wellengleichung kann nach (1.2.3./14) allgemein als Überlagerung zweier Kugelwellen

$$\boldsymbol{E} = \frac{\boldsymbol{E}_1}{r} f\left(t - \sqrt{\varepsilon\mu}\, r\right) + \frac{\boldsymbol{E}_2}{r} f\left(t + \sqrt{\varepsilon\mu}\, r\right) \tag{20}$$

dargestellt werden. $\boldsymbol{E}_1$ und $\boldsymbol{E}_2$ sind Konstanten.
Wie aus (20) hervorgeht, stellt die Größe

$$\boxed{u = \frac{1}{\sqrt{\varepsilon\mu}}} \tag{21}$$

die Phasengeschwindigkeit der Lichtwelle dar.
Neben der Phasengeschwindigkeit ist der **Wellenwiderstand** von Interessse (vgl. [4] 4.4.). Dieser ist gemäß

$$Z = \sqrt{\frac{\mu}{\varepsilon}} \tag{22}$$

definiert (siehe auch 1.3.1.).

**Beispiel 1.3.1. Phasengeschwindigkeit und Wellenwiderstand im Vakuum**

Erfolgt die Ausbreitung der Lichtwelle im Vakuum, so erhält man für die Phasengeschwindigkeit

$$u = \frac{1}{\sqrt{\varepsilon_0 \mu_0}} = \frac{1}{\sqrt{8{,}8542 \cdot 10^{-12} \cdot 1{,}2566 \cdot 10^{-6}}} \text{ m s}^{-1} = 2{,}9979 \cdot 10^8 \text{ m s}^{-1}. \tag{23a}$$

Der Wellenwiderstand im Vakuum ist

$$Z_0 = \sqrt{\frac{\mu_0}{\varepsilon_0}} = \sqrt{\frac{1{,}2566 \cdot 10^{-6}}{8{,}8542 \cdot 10^{-12}}}\, \Omega = 377\, \Omega. \tag{23b}$$

*Wellenzahlvektor und Brechzahl*

Für den Wellenzahlvektor einer ebenen Lichtwelle ergibt sich nach (1.2./21) und (1.2./23) auf Grund der Verknüpfung (1.2./21) zwischen den Größen $u$, $\varepsilon$ und $\mu$

$$\boldsymbol{k} = \omega \sqrt{\varepsilon \mu}\, (\cos \alpha, \cos \beta, \cos \gamma). \tag{24}$$

Darin geben $\cos \alpha$, $\cos \beta$, $\cos \gamma$ die Richtungscosinus der Ausbreitungsrichtung an. Die Brechzahl ist gemäß

$$\boxed{n = \frac{c}{u} = \sqrt{\frac{\varepsilon \mu}{\varepsilon_0 \mu_0}}} \tag{25}$$

definiert. Da $\mu$ in den meisten Fällen gleich der magnetischen Feldkonstanten gesetzt werden kann, folgt aus (25) genähert die MAXWELLsche Beziehung

$$n = \sqrt{\varepsilon_r}. \tag{26}$$

Dabei ist zu beachten, daß $\varepsilon$ und $\varepsilon_r$ frequenzabhängig sind.

**Beispiel 1.3.2. Brechzahl und Dielektrizitätskonstante für Wasser**

Wasser hat für ein statisches elektrisches Feld bei 20 °C die Dielektrizitätszahl $\varepsilon_r = 80{,}1$. Seine Brechzahl für sichtbares Licht ist $n = 1{,}33$. Daraus folgt als Dielektrizitätszahl für sichtbares Licht

$$\varepsilon_r = n^2 = 1{,}33^2 = 1{,}78.$$

Unter Verwendung der Brechzahl kann man den Wellenzahlvektor

$$\boldsymbol{k} = n \boldsymbol{k}_0 \tag{27}$$

schreiben, wobei

$$\boldsymbol{k}_0 = \omega \sqrt{\varepsilon_0 \mu_0}\, (\cos \alpha, \cos \beta, \cos \gamma) \tag{28}$$

den Wellenzahlvektor für das Vakuum darstellt.

*Polarisationsebene*

Um die Polarisation linear polarisierten Lichtes zu kennzeichnen, wird die Polarisationsebene eingeführt. Sie gibt die Ebene senkrecht zur dielektrischen Verschiebung $\boldsymbol{D}$ an, enthält also die Normalen der Wellenflächen. Bei elliptisch oder zirkular polarisiertem Licht dreht sich die Polarisationsebene mit $\boldsymbol{D}$.
Fällt Licht über eine Begrenzungsfläche ein, so bezeichnet man die aus dem Lichtstrahl und der Flächennormale gebildete Ebene als **Einfallsebene**. Schwingt $\boldsymbol{D}$ senkrecht zur Einfallsebene, so sind Polarisations- und Einfallsebene zueinander parallel. Man spricht in diesem Fall daher von paralleler Polarisation. Dagegen bedeutet orthogonale Polarisation, daß $\boldsymbol{D}$ parallel zur Einfallsebene schwingt.



## Probleme

### 1.3.1. Linear polarisierte ebene Welle

Ein Bündel paralleler Strahlen wird nach der Wellentheorie durch eine ebene elektromagnetische Welle repräsentiert. Bestimmen Sie das elektromagnetische Feld der ebenen Welle. Wie groß sind der elektrische und der magnetische Vektor bei der Lichtausbreitung im Vakuum, wenn die Energieflußdichte bzw. Bestrahlungsstärke $L_e = S = 0{,}1\ \mathrm{W\,m^{-2}}$ gemessen wird?

**Lösung:**

Wir legen die Ausbreitungsrichtung der Welle in die $z$-Richtung. Bei einer ebenen Welle hängen $\boldsymbol{E}$ und $\boldsymbol{H}$ damit nur noch von der Raumkoordinate $z$ und der Zeitkoordinate $t$ ab:

$$\boldsymbol{E} = \boldsymbol{E}(z, t), \qquad \boldsymbol{H} = \boldsymbol{H}(z, t). \tag{1}$$

In den MAXWELLschen Gleichungen (1.3./7) bis (1.3./10) verschwinden die Ableitungen nach $x$ und $y$. Ferner können wir

$$\boldsymbol{D} = \varepsilon \boldsymbol{E}, \qquad \boldsymbol{B} = \mu \boldsymbol{H} \tag{2}$$

sowie

$$\varrho = 0 \tag{3}$$

einsetzen. Damit folgt in Cartesischen Koordinaten

$$\left.\begin{aligned}
&\varepsilon \frac{\partial E_x}{\partial t} = -\frac{\partial H_y}{\partial z}, \qquad \varepsilon \frac{\partial E_y}{\partial t} = \frac{\partial H_x}{\partial z}, \qquad \varepsilon \frac{\partial E_z}{\partial t} = 0;\\
&-\mu \frac{\partial H_x}{\partial t} = -\frac{\partial E_y}{\partial z}, \qquad -\mu \frac{\partial H_y}{\partial t} = \frac{\partial E_x}{\partial z}, \qquad -\mu \frac{\partial H_z}{\partial t} = 0;\\
&\frac{\partial E_z}{\partial z} = 0;\\
&\frac{\partial H_z}{\partial z} = 0.
\end{aligned}\right\} \tag{4}$$

Auf Grund der dritten und siebenten bzw. sechsten und achten Gleichung sind $E_z$ und $H_z$ zeitlich und räumlich konstant. Da statische Felder für die Lichtausbreitung ohne Interesse sind, können wir $E_z = 0$, $H_z = 0$ setzen.

Von den 8 Gleichungen verbleiben somit vier. Es ergeben sich die beiden voneinander unabhängigen Gleichungssysteme

$$\varepsilon \frac{\partial E_x}{\partial t} = -\frac{\partial H_y}{\partial z}, \qquad -\mu \frac{\partial H_y}{\partial t} = \frac{\partial E_x}{\partial z} \tag{5}$$

und

$$\varepsilon \frac{\partial E_y}{\partial t} = \frac{\partial H_x}{\partial z}, \qquad \mu \frac{\partial H_x}{\partial t} = \frac{\partial E_y}{\partial z}. \tag{6}$$

Das Licht stellt somit eine transversale elektromagnetische Welle dar. Sie setzt sich aus zwei voneinander unabhängigen Komponenten $E_x$, $H_y$ und $E_y$, $H_x$ zusammen.
Wir setzen linear polarisiertes Licht voraus. Die $x$-Achse legen wir in die Schwingungsrichtung des elektrischen Feldes. Mit $E_y = 0$ wird, abgesehen von einem statischen Feld, nach (6) $H_x$ gleich Null. Es verbleiben nur die Komponenten $E_x$ und $H_y$: $\boldsymbol{E}$ und $\boldsymbol{H}$ stehen aufeinander senkrecht.
Im Gleichungssystem (5) eliminieren wir $H_y$, indem wir die erste Gleichung nach $t$ differenzieren und mit $\mu$ multiplizieren, die zweite nach $z$ differenzieren. Durch Vergleich ergibt sich die Wellengleichung

$$\frac{\partial^2 E_x}{\partial z^2} - \varepsilon\mu \frac{\partial^2 E_x}{\partial t^2} = 0. \tag{7}$$

Sie wird durch den Ansatz

$$E_x = E_0 \, \mathrm{e}^{\mathrm{i}(\omega t - kz)} \tag{8}$$

gelöst. Er liefert die algebraische Gleichung

$$-k^2 + \varepsilon\mu\omega^2 = 0$$

bzw. in Übereinstimmung mit (1.2./22)

$$k = \frac{\omega}{u}. \tag{9}$$

Für $H_y$ ergibt sich nach (5) durch Elimination von $E_x$ dieselbe Abhängigkeit von $z$ und $t$ wie für $E_x$:

$$H_y = H_0 \, \mathrm{e}^{\mathrm{i}(\omega t - kz)}. \tag{10}$$

Daher kann die Ableitung nach $z$ durch die Multiplikation mit $-\mathrm{i}k$, die Ableitung nach $t$ durch die Multiplikation mit $\mathrm{i}\omega$ ersetzt werden:

$$\frac{\partial}{\partial z} \to -\mathrm{i}k, \qquad \frac{\partial}{\partial t} \to \mathrm{i}\omega. \tag{11}$$

Anstelle des Gleichungssystems (5) erhalten wir

$$\mathrm{i}\omega\varepsilon E_0 = \mathrm{i}kH_0, \qquad \mathrm{i}\omega\mu_0 H_0 = \mathrm{i}kE_0, \tag{12}$$

woraus unter Berücksichtigung von (9) und (1.3./21)

$$\boxed{\frac{E_0}{H_0} = \sqrt{\frac{\mu}{\varepsilon}} = Z} \tag{13}$$

folgt. $Z$ ist der Wellenwiderstand des Mediums.

Die Mittelwerte der elektrischen und der magnetischen Feldstärke sind bei harmonischen Schwingungen durch

$$\bar{E} = \frac{1}{2}\sqrt{2}\,E_0, \qquad \bar{H} = \frac{1}{2}\sqrt{2}\,H_0 \tag{14}$$

gegeben. Für die mittlere Dichte des Energiestromes, d. h. für die Strahldichte, folgt aus dem POYNTINGschen Vektor (1.3./12) im vorliegenden Fall

$$\bar{S} = \bar{E}\bar{H} = \frac{1}{2}\,E_0H_0 = \frac{1}{2}\,\frac{E_0^2}{Z_0}. \tag{15}$$

Mit dem vorgegebenen Wert $S = 0{,}1\ \mathrm{W\ m^{-2}}$ erhält man

$$E_0 = \sqrt{2\bar{S}Z_0} = \sqrt{2\cdot 0{,}1\cdot 377}\ \mathrm{V\ m^{-1}} = 8{,}68\ \mathrm{V\ m^{-1}},$$

$$H_0 = \sqrt{\frac{2\bar{S}}{Z_0}} = \sqrt{\frac{2\cdot 0{,}1}{377}}\ \mathrm{A\ m^{-1}} = 0{,}0230\ \mathrm{A\ m^{-1}}.$$

Das Gleichungssystem (6) kann durch eine Transformation

$$E_y \to E_x, \qquad H_x \to -H_y$$

in das Gleichungssystem (5) überführt werden. Aus der Lösung von (6) ergeben sich daher keine neuen Wellentypen.

## 1.3.2. Ebene Welle bei paralleler Polarisation

Ein Bündel paralleler Strahlen fällt unter dem Winkel $\alpha = 30°$ im Wasser ($n = 1{,}33$) gegen Luft ein. Der elektrische Vektor schwingt senkrecht zur Einfallsebene.
Bestimmen Sie die Komponenten des elektromagnetischen Feldes und die Energieflußdichte.
Die Amplitude des elektrischen Feldes sei $E_0 = 10\ \mathrm{kV\ m^{-1}}$.

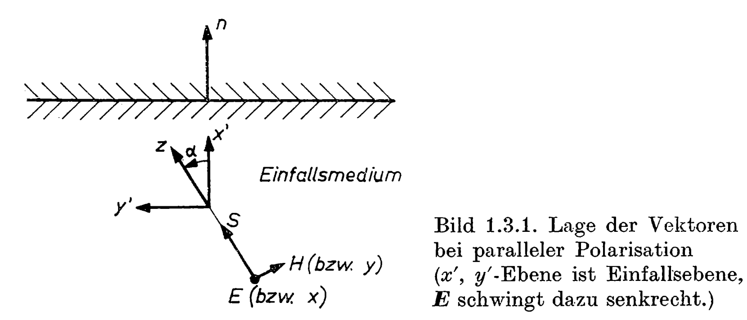



Bild 1.3.1. Lage der Vektoren bei paralleler Polarisation ($x'$, $y'$-Ebene ist Einfallsebene, $\boldsymbol{E}$ schwingt dazu senkrecht.)

**Lösung:**

Wir setzen die Begrenzung des betrachteten Mediums an der Einfallsstelle als eben voraus. Als $x'$-Achse wählen wir die aus dem Einfallsmedium hinausweisende Flächennormale. $y'$-Achse wird die in der Einfallsebene liegende Richtung senkrecht zur $x'$-Achse. Die $z'$-Achse steht senkrecht zur Einfallsebene (vgl. Bild 1.3.1). Sie ist mit der $x$-Achse in 1.3.1. identisch. Die $y$, $z$-Ebene in 1.3.1. fällt folglich mit der $x'$, $y'$-Ebene zusammen. $x'$- und $z$-Achse bilden mit-

einander den Winkel $\alpha$. Daraus ergibt sich für die Koordinatentransformation (vgl. 3.1.2.)

$$\begin{pmatrix} x' \\ y' \\ z' \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & \sin\alpha & \cos\alpha \\ 0 & -\cos\alpha & \sin\alpha \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix}. \tag{1}$$

Da im $x, y, z$-System nach 1.3.1. nur die elektrische Komponente $E_x$ und die magnetische Komponente $H_y$ auftreten, folgt nach (1) für das $x', y', z'$-System

$$E_{x'} = 0, \qquad E_{y'} = 0, \qquad E_{z'} = E_x; \tag{2}$$

$$H_{x'} = H_y \sin\alpha, \qquad H_{y'} = -H_y \cos\alpha, \qquad H_z' = 0. \tag{3}$$

Weiter folgt aus (1)

$$z = x' \cos\alpha + y' \sin\alpha, \tag{4}$$

so daß die Phasenabhängigkeit gemäß

$$\mathrm{e}^{\mathrm{i}[\omega t - k(x'\cos\alpha + y'\sin\alpha)]} = \mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega t}\, \mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}'} \tag{5}$$

dargestellt wird mit

$$\boldsymbol{k} = k(\cos\alpha, \sin\alpha, 0), \qquad \boldsymbol{r}' = (x', y', z'). \tag{6}$$

Für die Energieflußdichte $\boldsymbol{S} = \boldsymbol{E} \times \boldsymbol{H}$ ergibt sich

$$\boldsymbol{S} = \begin{vmatrix} i & j & k \\ 0 & 0 & E_0 \\ H_0 \sin\alpha & -H_0 \cos\alpha & 0 \end{vmatrix} \mathrm{e}^{\mathrm{i}(\omega t - \boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}')} = E_0 H_0 \begin{pmatrix} \cos\alpha \\ \sin\alpha \\ 0 \end{pmatrix} \mathrm{e}^{\mathrm{i}(\omega t - \boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}')}. \tag{7}$$

Der Energiefluß hat somit die Richtung der sich fortpflanzenden Welle bzw. des Lichtstrahles. Nach (1.3.1./13) folgt für die Amplitude des magnetischen Feldes, wenn $\mu = \mu_0$ angenommen wird,

$$H_0 = \frac{E_0}{Z} = \sqrt{\frac{\varepsilon}{\mu}}\, E_0 = n\,\frac{E_0}{Z_0}. \tag{8}$$

Mit den vorgegebenen Werten erhalten wir

$$H_0 = 1{,}33 \cdot \frac{10 \cdot 10^3}{377}\ \mathrm{A\,m^{-1}} = 35{,}3\ \mathrm{A\,m^{-1}}$$

und damit für den Energiefluß nach (1.3.1./15)

$$\bar{S} = \frac{1}{2} \cdot 10 \cdot 10^3 \cdot 35{,}3\ \mathrm{W\,m^{-2}} = 176{,}5\ \mathrm{kW\,m^{-2}}.$$

## 1.3.3. Ebene Welle bei orthogonaler Polarisation

Bestimmen Sie die Komponenten des elektromagnetischen Feldes einer ebenen Welle, wenn die Polarisationsebene senkrecht zur Einfallsebene steht.

**Lösung:**

Im $x', y', z'$-System ist die $x', y'$-Ebene Einfallsebene. Dagegen ist im $x, y, z$-System nach Bild 1.3.2 die $x, z$-Ebene Einfallsebene, da $\boldsymbol{E}$ parallel, $\boldsymbol{H}$ orthogonal hierzu schwingt. Die $z'$-Achse ist mit der $y$-Achse identisch. $x'$-Achse und $z$-Achse schließen miteinander den Winkel $\alpha$ ein. Man

erhält die Transformationsformel

$$\begin{pmatrix} x' \\ y' \\ z' \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -\sin\alpha & 0 & \cos\alpha \\ \cos\alpha & 0 & \sin\alpha \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix}. \tag{1}$$

Somit folgt für die Komponenten des elektromagnetischen Feldes

$$E_{x'} = -E_x \sin\alpha, \qquad E_{y'} = E_x \cos\alpha, \qquad E_{z'} = 0; \tag{2}$$

$$H_{x'} = 0, \qquad H_{y'} = 0 \qquad H_{z'} = H_y'. \tag{3}$$

Die Phasenabhängigkeit ist die gleiche wie nach (1.3.2./5).

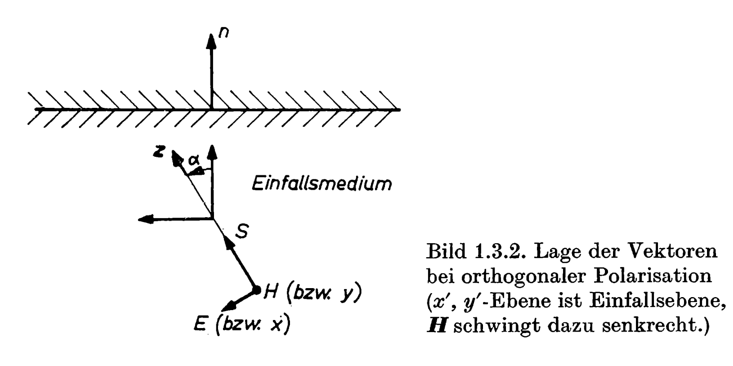



Bild 1.3.2. Lage der Vektoren bei orthogonaler Polarisation ($x'$, $y'$-Ebene ist Einfallsebene, $\boldsymbol{H}$ schwingt dazu senkrecht.)

## 1.3.4. Elliptisch polarisierte elektromagnetische Welle

In einer elliptisch polarisierten Welle hat die große Halbachse der Schwingungsellipse die Richtung senkrecht zur Einfallsebene. Die numerische Exzentrizität der Schwingungsellipse ist $\varepsilon = 0{,}6$. Als Energieflußdichte werden $\bar{S} = 15\ \mathrm{W\,m^{-2}}$ gemessen. Das Ausbreitungsmedium ist Wasser ($n = 1{,}33$). Bestimmen Sie die Komponenten des elektrischen Feldes.

**Lösung:**

Nach (1.3.2./2) und (1.3.3./2) schreiben wir die Komponenten

$$\left.\begin{aligned} &E_{x'} = -E_{0b} \sin\alpha\, \mathrm{e}^{\cdots}, \qquad E_{y'} = E_{0b} \cos\alpha\, \mathrm{e}^{\cdots}, \qquad E_{z'} = E_{0a}\, \mathrm{e}^{\cdots}; \\ &H_{x'} = \sqrt{\frac{\varepsilon}{\mu}}\, E_{0a} \sin\alpha\, \mathrm{e}^{\cdots}, \qquad H_{y'} = -\sqrt{\frac{\varepsilon}{\mu}}\, E_{0a} \cos\alpha\, \mathrm{e}^{\cdots}, \\ &H_{z'} = \sqrt{\frac{\varepsilon}{\mu}}\, E_{0b}\, \mathrm{e}^{\cdots} \end{aligned}\right\} \tag{1}$$

mit

$$\mathrm{e}^{\cdots} = \mathrm{e}^{\mathrm{i}[\omega t - k(x'\cos\alpha + y'\sin\alpha)]}. \tag{1a}$$

Aus (1) ergibt sich der POYNTINGsche Vektor

$$\boldsymbol{S} = \sqrt{\frac{\varepsilon}{\mu}} \begin{vmatrix} i & j & k \\ -E_{0b}\sin\alpha & E_{0b}\cos\alpha & E_{0a} \\ E_{0a}\sin\alpha & -E_{0a}\cos\alpha & E_{0b} \end{vmatrix} \mathrm{e}^{\cdots}. \tag{2}$$

Hieraus folgt nach Einsetzen der Brechzahl

$$\boldsymbol{S} = n \frac{E_{0a}^2 + E_{0b}^2}{Z_0} \begin{pmatrix} \cos \alpha \\ \sin \alpha \\ 0 \end{pmatrix} \mathrm{e}^{\cdots} \tag{3}$$

bzw. in der Ausbreitungsrichtung

$$\bar{S} = \frac{1}{2} n \frac{E_{0a}^2 + E_{0b}^2}{Z_0}. \tag{4}$$

Zwischen den Amplituden besteht die Beziehung

$$\frac{\sqrt{E_{0a}^2 - E_{0b}^2}}{E_{0a}} = \varepsilon. \tag{5}$$

Im vorliegenden Fall ergibt sich

$$\frac{E_{0a}}{E_{0b}} = 1{,}25.$$

Daraus folgt in Verbindung mit (4) durch Auflösen

$$E_{0a} = \sqrt{\frac{377}{0{,}9 \cdot 1{,}33} \cdot 15 \text{ V m}^{-1}} = 68{,}7 \text{ V m}^{-1}$$

sowie

$$E_{0b} = 55{,}0 \text{ V m}^{-1}.$$



## Aufgaben

A 1.3.1. Berechnen Sie aus den Grundgesetzen der Mechanik über Kraft und Energiefluß den **Lichtdruck** $p_{\text{opt}}$ einer Lichtwelle der Strahldichte 1 W $\text{m}^{-2}$, wenn diese vollständig reflektiert wird.

A 1.3.2. Ein Blättchen mit den Abmessungen $2a = 6$ cm, $b = 1$ cm ist an seiner kurzen Mittellinie drehbar angeordnet. Auf die eine Seite falle ein Lichtstrom der Strahldichte 0,01 W $\text{m}^{-2}$ und werde vollständig reflektiert. Welches Drehmoment wird dadurch erzeugt?

A 1.3.3. Berechnen Sie den Druck $p$ auf eine Fläche durch einen unter dem Winkel $\alpha = 60°$ einfallenden Strahl bei Totalreflexion, wenn die Strahldichte 0,015 W $\text{m}^{-2}$ beträgt. Welche Kraft wird ausgeübt, wenn die bestrahlte Fläche $A = 2 \text{ m}^2$ beträgt?

A 1.3.4. Durch die Sonne wird der Erde eine Energie von 1,4 kJ $\text{m}^{-2}\,\text{s}^{-1}$ zugestrahlt. Geben Sie die Amplitude des elektromagnetischen Feldes der Sonnenstrahlung an.

A 1.3.5. Eine ebene Welle pflanzt sich im $x$, $y$, $z$-Koordinatensystem in der Richtung vom Punkt (0, 0, 0) zum Punkt (1, 1, −1) fort. Die Frequenz beträgt $f = 10^{15}$ Hz, die Brechzahl $n = 1{,}5$. Geben Sie den Wellenzahlvektor und den Vektor des elektrischen Feldes der Welle an.

A 1.3.6. Wie groß sind $E_0$ und $H_0$ bei einer Strahlung der Wellenlänge 555 nm, wenn damit die Beleuchtung 10000 lx erzielt wird?

A 1.3.7. Eine zirkular polarisierte Welle breitet sich in Glas mit der Brechzahl $n = 1{,}6$ aus. Die Energieflußdichte beträgt 10 W $\text{m}^{-2}$. Wie groß sind die Amplituden des elektromagnetischen Feldes?

A 1.3.8. An einer Trennfläche muß an Energie das, was aus dem Medium *1* zuströmt, ins Medium *2* abströmen. Welche Gleichungen ergeben sich daraus an der Trennfläche für die Feldgrößen $\boldsymbol{E}$ und $\boldsymbol{H}$?

A 1.3.9. Ein $x$, $y$, $z$-Koordinatensystem sei so festgelegt, daß die Symmetrieachse eines Kristalls mit der $z$-Achse zusammenfällt, während die $y$-Achse in der Begrenzungsebene des Kristalls liegt. Dagegen verdreht werde ein $x'$, $y'$, $z'$-Koordinatensystem definiert, dessen $x'$, $z'$-Ebene mit der Einfallsebene identisch ist. Die $z'$-Achse weise senkrecht zur Begrenzungsebene in den Kristall. Der Winkel zwischen der Symmetrieachse und dem Lot der Begrenzungsebene sei $\varepsilon$, der Winkel zwischen der Projektion der Symmetrieachse auf die Trennebene und der Schnittgeraden von Trenn- und Einfallsebene $\xi$. Welcher Zusammenhang besteht zwischen den beiden Koordinatensystemen?

A 1.3.10. Bestimmen Sie die Bewegung und den Impuls einer Ladung $e$ im Feld einer linear polarisierten monochromatischen Welle $E = E_0 \cos(\omega t + kx)$.

A 1.3.11. Bestimmen Sie die Bewegung und den Impuls einer Ladung $e$ im Feld einer zirkular polarisierten Welle $E_y = E_0 \cos(\omega t - kx)$, $E_z = E_0 \sin(\omega t - kx)$.

A 1.3.12. Licht der Energieflußdichte 48 W m$^{-2}$ sei elliptisch polarisiert. Das Verhältnis der Ellipsenachsen betrage 1,25. Berechnen Sie die Amplituden des elektrischen Feldes. Das Medium habe die Brechzahl $n = 1{,}33$.

## 1.4. Absorption, Dispersion, Fourier-Entwicklung

### E Einführung

*Komplexe Dielektrizitätskonstante und Maxwellsche Gleichungen*

In absorbierenden Medien ist die elektrische Leitfähigkeit $\gamma$ von Null verschieden. Mit dem periodisch veränderlichen Feld $\boldsymbol{E}$ tritt daher nach dem Ohmschen Gesetz $\boldsymbol{J} = \gamma \boldsymbol{E}$ auch ein periodisch veränderlicher elektrischer Strom auf. Aus den Maxwellschen Gleichungen folgt nach (1.3./7), wenn die lineare Verknüpfung $\boldsymbol{D} = \varepsilon \boldsymbol{E}$ eingesetzt wird, im Falle einer Zeitabhängigkeit der Form $e^{i\omega t}$

$$i\varepsilon\omega \boldsymbol{E} + \gamma \boldsymbol{E} = \operatorname{rot} \boldsymbol{H}. \tag{1}$$

Die beiden Summanden links können zusammengefaßt werden, wenn man die komplexe Dielektrizitätskonstante

$$\varepsilon' = \varepsilon \left(1 - i \frac{\gamma}{\varepsilon\omega}\right) \tag{2}$$

einführt. Damit ergibt sich als erste Maxwellsche Gleichung

$$i\varepsilon'\omega \boldsymbol{E} = \operatorname{rot} \boldsymbol{H}. \tag{3}$$

Aus den weiteren Maxwellschen Gleichungen (1.3./8) bis (1.3./10) erhält man unter Verwendung der linearen Verknüpfungen $\boldsymbol{B} = \mu \boldsymbol{H}$ und $\boldsymbol{D} = \varepsilon \boldsymbol{E}$ für homogene Medien

$$i\mu\omega \boldsymbol{H} = -\operatorname{rot} \boldsymbol{E}, \tag{4}$$

$$\operatorname{div} \boldsymbol{E} = 0, \tag{5}$$

$$\operatorname{div} \boldsymbol{H} = 0. \tag{6}$$

*Komplexe Brechzahl und komplexer Wellenzahlvektor*

Entsprechend (1.3./25) definiert man als **komplexe Brechzahl**

$$\boxed{n' = \sqrt{\frac{\varepsilon'\mu}{\varepsilon_0\mu_0}} = n(1 - \mathrm{i}\varkappa).} \tag{7}$$

Die Größe $\varkappa$ heißt **Absorptionsindex.**
Setzt man $\varepsilon'$ nach (2) in (7) ein und quadriert, so erhält man durch Trennung von Real- und Imaginärteil ein System zweier Gleichungen für $n$ und $\varkappa$:

$$n^2(1 - \varkappa^2) = \frac{\varepsilon\mu}{\varepsilon_0\mu_0}, \tag{8}$$

$$2n^2\varkappa = \frac{\mu\gamma}{\omega\varepsilon_0\mu_0}. \tag{9}$$

Als Lösung folgt

$$n = \sqrt{\frac{1}{2}\frac{\varepsilon\mu}{\varepsilon_0\mu_0} + \frac{1}{2}\sqrt{\frac{\varepsilon^2\mu^2}{\varepsilon_0^2\mu_0^2} + \frac{\mu^2\gamma^2}{\omega^2\varepsilon_0^2\mu_0^2}}}, \tag{10}$$

$$n\varkappa = \sqrt{-\frac{1}{2}\frac{\varepsilon\mu}{\varepsilon_0\mu_0} + \frac{1}{2}\sqrt{\frac{\varepsilon^2\mu^2}{\varepsilon_0^2\mu_0^2} + \frac{\mu^2\gamma^2}{\omega^2\varepsilon_0^2\mu_0^2}}}. \tag{11}$$

Für den **komplexen Wellenzahlvektor** ergibt sich nach (1.3./24) bzw. (1.3./27)

$$\begin{aligned} \boldsymbol{k}' &= \omega\sqrt{\varepsilon'\mu}\,(\cos\alpha, \cos\beta, \cos\gamma) = n(1 - \mathrm{i}\varkappa)\,\boldsymbol{k}_0 \\ &= n(1 - \mathrm{i}\varkappa)\,\frac{2\pi}{\lambda_0}\,(\cos\alpha, \cos\beta, \cos\gamma), \end{aligned} \tag{12}$$

wobei $\lambda_0$ die Wellenlänge im Vakuum kennzeichnet. Die Größe

$$k'' = \frac{2\pi\varkappa}{\lambda} = \frac{2\pi n\varkappa}{\lambda_0} \tag{13}$$

wird als **Absorptionskoeffizient** (auch Absorptionskonstante) bezeichnet. Mit dieser kann die komplexe Wellenzahl auch in der Form

$$k' = k - \mathrm{i}k'' \tag{14}$$

dargestellt werden.

*Absorption und Dispersion*

Das atomistische Modell der Absorption des Lichtes durch ein Medium liefert zugleich die Abhängigkeit der Brechzahl von der Frequenz.
Im elektrischen Feld $\boldsymbol{E} = \boldsymbol{E}_0\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega t}$ nimmt ein Atom oder Molekül ein periodisch ver-

änderliches elektrisches Moment an, wodurch auch das gesamte Medium periodisch veränderlich polarisiert wird. Das angelegte Feld verschiebt die Ladungen $\pm Ze$ des Teilchens aus ihrer Gleichgewichtslage. Bezeichnet $N$ die Anzahl der Teilchen je Kubikmeter und $\boldsymbol{r}$ den von der negativen zur positiven Ladung gezogenen Vektor, so gibt

$$\boldsymbol{m}_{\mathrm{e}} = Ze\boldsymbol{r} \tag{15}$$

das elektrische Moment des Teilchens,

$$\boldsymbol{P} = (\varepsilon' - \varepsilon_0)\,\boldsymbol{E} = N\boldsymbol{m}_{\mathrm{e}} \tag{16}$$

die Polarisation des Mediums an.
Die Bewegung eines Teilchens unter dem Einfluß einer erzwingenden Kraft $\boldsymbol{F} = \boldsymbol{F}_0\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega t}$ ist durch die Gleichung

$$m\ddot{\boldsymbol{r}} + m\varrho\dot{\boldsymbol{r}} + m\omega_0^2\boldsymbol{r} = \boldsymbol{F} = \boldsymbol{F}_0\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega t} \tag{17}$$

gegeben. Darin bezeichnet $m$ die Teilchenmasse und $\varrho$ den Abklingkoeffizienten. Bei fehlender äußerer Einwirkung ist $\varrho$ mit der Abklingzeit $\tau$ der Schwingung gemäß

$$\tau = \frac{1}{\varrho} \tag{18}$$

verknüpft. $\tau$ stellt die mittlere Aufenthaltsdauer der Oszillatorenergie dar. Bezeichnet $a$ die Kraft je Einheit der Auslenkung, so ist die Kreisfrequenz der Eigenschwingung durch

$$\omega_0 = \sqrt{\frac{a}{m}} \tag{19}$$

gegeben.
Die stationäre Lösung nach Abklingen der Eigenschwingungen folgt aus dem Ansatz

$$\boldsymbol{r} = \boldsymbol{r}_0\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega t}. \tag{20}$$

Nach Einsetzen in (17) und Herausheben des gemeinsamen Faktors $\mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega t}$ erhält man

$$\boldsymbol{r}_0 = \frac{\boldsymbol{F}_0}{m(\omega_0^2 - \omega^2 + \mathrm{i}\varrho\omega)}. \tag{21}$$

Zwischen dem effektiv auf das Teilchen wirkenden Feld $\hat{\boldsymbol{E}}$ und der äußeren Kraft $\boldsymbol{F}$ besteht die Beziehung

$$\boldsymbol{F} = Ze\hat{\boldsymbol{E}}. \tag{22}$$

Unter dem Einfluß des Feldes $\hat{\boldsymbol{E}} = \hat{\boldsymbol{E}}_0\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega t}$ erhält man damit nach (15) und (16) für die Polarisation des Mediums

$$\boldsymbol{P} = NZe\boldsymbol{r} = \frac{NZ^2e^2\hat{\boldsymbol{E}}}{m(\omega_0^2 - \omega^2 + \mathrm{i}\varrho\omega)}. \tag{23}$$

Das effektive Feld $\hat{\boldsymbol{E}}$ unterscheidet sich vom makroskopischen $\boldsymbol{E}$, das durch Messung bestimmt werden kann (vgl. [5] 3.2.). Zum makroskopischen Feld $\boldsymbol{E}$ tragen sämtliche Ladungen bei; zu dem auf ein geladenes Teilchen wirkenden Feld $\hat{\boldsymbol{E}}$ trägt die Ladung dieses Teilchens selbst nichts bei.
Das betrachtete Teilchen kann als punktförmig angesehen und durch eine Hohlkugel umgrenzt werden, die sonst leer ist. Ihre Dielektrizitätskonstante wird damit gleich der elektrischen Feldkonstanten $\varepsilon_0$. Bringt man eine Kugel mit der Dielektrizitätskonstanten $\varepsilon_\mathrm{i} = \varepsilon_0$ in ein homogenes elektrisches Feld $\boldsymbol{E} = \boldsymbol{E}_\mathrm{a}$, so wird in der Kugel das homogene Feld

$$\boldsymbol{E}_\mathrm{i} = \frac{2\varepsilon_\mathrm{i} + \varepsilon_\mathrm{a}}{3\varepsilon_\mathrm{i}} \boldsymbol{E}_\mathrm{a} \tag{24}$$

aufgebaut (vgl. [4] 2.1.). $\varepsilon_\mathrm{a} = \varepsilon'$ bezeichnet die Dielektrizitätskonstante des umgebenden Mediums.
Als Beziehung zwischen dem effektiven Feld $\hat{\boldsymbol{E}}$ und dem makroskopischen Feld $\boldsymbol{E}$ folgt damit

$$\hat{\boldsymbol{E}} = \frac{2\varepsilon_0 + \varepsilon'}{3\varepsilon_0} \boldsymbol{E}. \tag{25}$$

Anstelle (25) kann man wegen (16)

$$\hat{\boldsymbol{E}} = \boldsymbol{E} + \frac{\boldsymbol{P}}{3\varepsilon_0} \tag{26}$$

schreiben. Setzt man (26) in (23) ein, so erhält man mittels (16)

$$\frac{\varepsilon' - \varepsilon_0}{\varepsilon' + 2\varepsilon_0} = \frac{n'^2 - 1}{n'^2 + 2} = \frac{1}{3\varepsilon_0} \frac{NZ^2e^2}{m(\omega_0{}^2 - \omega^2 + \mathrm{i}\varrho\omega)}. \tag{27}$$

*Drudesche Formel — Fourier-Analyse*

Treten in einem Medium mehrere Eigenschwingungen mit den Kreisfrequenzen $\omega_i$ ($i = 1, 2, \ldots$) auf und bezeichnet $m_i$ die Massen, $\varrho_i$ die Abklingkonstanten, $Z_i$ die Anzahl der Elementarladungen, $N_i$ die Anzahl der schwingenden Teilchen je Kubikmeter, so ist die Auslenkung $\boldsymbol{r}_i$ durch

$$\boldsymbol{r}_i = \frac{\boldsymbol{F}_0}{m_i(\omega_i{}^2 - \omega^2 + \mathrm{i}\varrho_i\omega_i)} \tag{21a}$$

mit der resultierenden Auslenkung

$$\boldsymbol{r} = \sum_i \boldsymbol{r}_i \tag{21b}$$

gegeben. Für die Polarisation des Mediums folgt

$$\boldsymbol{P} = \sum_i N_i Z_i e \boldsymbol{r}_i. \tag{23a}$$

Man gelangt damit zur DRUDEschen Formel

$$\boxed{\frac{\varepsilon' - \varepsilon_0}{\varepsilon' + 2\varepsilon_0} = \frac{n'^2 - 1}{n'^2 + 2} = \frac{1}{3\varepsilon_0} \sum_i \frac{N_i Z_i^2 e^2}{m_i(\omega_i^2 - \omega^2 + \mathrm{i}\varrho_i\omega_i)}} . \tag{28}$$

Die DRUDEsche Formel gründet sich auf die Zerlegung der resultierenden Schwingung eines Teilchens in die periodischen Bestandteile. Diese Zerlegung erfolgt mathematisch durch die FOURIER-Analyse. Physikalisch wird die FOURIER-Analyse durch die Eigenschaften des harmonischen Oszillators realisiert. Dieser filtert aus erzwungenen Schwingungen verstärkt diejenigen aus, die in der Nähe der Eigenfrequenz des harmonischen Oszillators liegen.

## P Probleme

### 1.4.1. Absorption einer Lichtwelle

Infrarotes Licht der Frequenz $f = 10^{12}$ Hz geht durch eine wäßrige Lösung. Dabei wird die Wellenlänge $\lambda = 215\ \mu$m gemessen. Die Intensität des Lichtes sinkt in 15 cm Tiefe auf den Anteil 1/e gegenüber der Intensität beim Eintritt in das Medium ab.
Bestimmen Sie die Brechzahl, den Absorptionsindex und die spezifische elektrische Leitfähigkeit.

**Lösung:**

Wir wählen die $z$-Achse als Ausbreitungsrichtung, während die $x$-Achse die Schwingungsrichtung des elektrischen Feldes kennzeichnet. An der Eintrittsstelle ist $z = 0$.
Der Übergang zu absorbierenden Medien bedeutet nach (1.4./7) und (1.4./12)

$$n \to n', \qquad \boldsymbol{k} \to \boldsymbol{k}'. \tag{1}$$

Gemäß (1.3.1./8) erhalten wir daher für die elektrische Feldstärke $\boldsymbol{E}$

$$E_x = E_0\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}(\omega t - k'z)}, \qquad E_y = 0, \qquad E_z = 0. \tag{2}$$

Dabei bedeutet $E_0$ die Amplitude an der Eintrittsstelle. Wir setzen $k'$ nach (1.4./12) in (2) ein und berücksichtigen

$$nk_0 = n\,\frac{2\pi}{\lambda_0} = \frac{2\pi}{\lambda}, \tag{3}$$

wobei $\lambda_0$ die Wellenlänge für Vakuum und $\lambda$ die für das absorbierende Medium kennzeichnet. Es folgt

$$E_x = E_0\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}\left(\omega t - \frac{2\pi}{\lambda} z\right)}\,\mathrm{e}^{-\frac{2\pi}{\lambda}\varkappa z}. \tag{4}$$

Nach (1.4./10) und (1.4./11) ergibt sich für $n$ und $n\varkappa$ im Falle $\mu = \mu_0$

$$n = \sqrt{\frac{1}{2}\varepsilon_\mathrm{r} + \frac{1}{2}\sqrt{\varepsilon_\mathrm{r}^2 + \frac{\gamma^2}{\omega^2\varepsilon_0^2}}}, \tag{5}$$

$$n\varkappa = \sqrt{-\frac{1}{2}\varepsilon_\mathrm{r} + \frac{1}{2}\sqrt{\varepsilon_\mathrm{r}^2 + \frac{\gamma^2}{\omega^2\varepsilon_0^2}}}. \tag{6}$$

Die Intensität einer Welle ist dem Quadrat des Absolutwertes der Amplitude proportional. Wegen

$$\frac{\lambda_0}{\lambda} = n \tag{7}$$

bedeutet daher das Abklingen auf den Anteil 1/e über die Strecke $z$

$$2k''z = \frac{4\pi}{\lambda_0}\, n\varkappa z = 1 \qquad \text{bzw.} \qquad n\varkappa = \frac{\lambda_0}{4\pi z}. \tag{8}$$

Mit den vorgegebenen Werten erhalten wir

$$n\varkappa = \frac{300 \cdot 10^{-6}\,\text{m}}{4\pi \cdot 0{,}15\,\text{m}} = 1{,}59 \cdot 10^{-4}.$$

Hieraus kann geschlossen werden, daß in (5) und (6)

$$\frac{\gamma^2}{\omega^2 \varepsilon_0{}^2} \ll \varepsilon_\text{r}{}^2 \tag{9}$$

gilt. Unter dieser Voraussetzung folgt aus (6)

$$n\varkappa = \frac{\gamma}{2\sqrt{\varepsilon_\text{r}}\,\omega\varepsilon_0}, \tag{10}$$

während (5) in die MAXWELLsche Beziehung

$$n = \sqrt{\varepsilon_\text{r}} \tag{11}$$

übergeht. Es ergibt sich daher aus (7) und (8)

$$n = \frac{300}{215} = 1{,}395, \qquad \varkappa = \frac{1{,}59 \cdot 10^{-4}}{1{,}395} = 1{,}14 \cdot 10^{-4}.$$

Für die gesuchte spezifische elektrische Leitfähigkeit bei der vorgegebenen Frequenz erhält man aus (10)

$$\gamma = 1{,}59 \cdot 10^{-4} \cdot 2 \cdot 1{,}395 \cdot 2\pi \cdot 10^{12} \cdot 8{,}85 \cdot 10^{-12}\,\Omega^{-1}\,\text{m}^{-1} = 0{,}0247\,\Omega^{-1}\,\text{m}^{-1}.$$

## 1.4.2. Phasenverschiebung zwischen elektrischem und magnetischem Feld

Eine linear polarisierte elektromagnetische Welle geht durch einen Halbleiter. Bestimmen Sie das magnetische Feld im Verhältnis zum elektrischen, wenn das Medium die Brechzahl $n = 1{,}5$ und den Absorptionsindex $\varkappa = 0{,}1$ hat.

**Lösung:**

Wir legen das Koordinatensystem nach 1.3.1. und das elektromagnetische Feld mit den Komponenten nach (1.3.1./8) bis (1.3.1./10) zugrunde. An die Stelle von $k$ tritt nach (1.4./13) $k'$. Zwischen den Amplituden $E_0$ und $H_0$ des elektrischen und des magnetischen Feldes besteht nach (1.3.1./13) und (1.4./7) für $\mu = \mu_0$ die Beziehung

$$\frac{H_0}{E_0} = \frac{n(1 - \imath\varkappa)}{Z_0}. \tag{1}$$

Dieses komplexe Verhältnis kennzeichnet eine zwischen dem elektrischen und dem magnetischen Feld bestehende Phasenverschiebung. Wir schreiben

$$1 - \mathrm{i}\varkappa = \sqrt{1 + \varkappa^2}\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\varphi} \tag{2}$$

mit

$$\varphi = \arctan \varkappa. \tag{3}$$

Daraus folgt

$$E_x = E_0\,\mathrm{e}^{-\frac{2\pi\varkappa}{\lambda}z}\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}\left(\omega t - \frac{2\pi}{\lambda}z\right)}, \tag{4}$$

$$H_y = \frac{E_0}{Z_0}\,n(1 + \varkappa^2)\,\mathrm{e}^{-\frac{2\pi\varkappa}{\lambda}z}\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}\left(\omega t - \varphi - \frac{2\pi}{\lambda}z\right)}. \tag{5}$$

Für die konstante Phasenverschiebung zwischen $\boldsymbol{E}$ und $\boldsymbol{H}$ ergibt sich damit nach (3)

$$\varphi = \arctan 0{,}1 = 5{,}7^\circ.$$

### 1.4.3. Ausbreitung einer Lichtwelle im Plasma — Plasmadiagnostik

Für die Ausbreitung einer Lichtwelle in einem Plasma gelten die gleichen Gesetzmäßigkeiten wie für ein gasförmiges, flüssiges oder festes Medium, wenn die Wellenlänge $\lambda$ groß gegen den mittleren Abstand $\bar{r}$ der Elektronen oder Ionen ist:

$$\lambda \gg \bar{r} = \frac{1}{\sqrt[3]{N}}. \tag{1}$$

$N$ gibt darin die Konzentration der positiv oder negativ geladenen Teilchen an.
Dielektrizität und Leitfähigkeit eines isotropen homogenen Plasmas in Abhängigkeit von der Kreisfrequenz $\omega$ sind durch die komplexe Dielektrizitätskonstante

$$\varepsilon' = \varepsilon_0(K_\mathrm{r} - \mathrm{i}K_\mathrm{i}) \tag{2}$$

gegeben mit

$$K_\mathrm{r} = 1 - \frac{\omega_\mathrm{p}^2}{\omega^2}\,\frac{1}{1 + \frac{\nu_\mathrm{eff}^2}{\omega^2}}, \tag{3}$$

$$K_\mathrm{i} = \frac{\nu_\mathrm{eff}}{\omega}\,\frac{\omega_\mathrm{p}^2}{\omega^2}\,\frac{1}{1 + \frac{\nu_\mathrm{eff}^2}{\omega^2}}. \tag{4}$$

Darin heißt

$$\omega_\mathrm{p} = \sqrt{\frac{e^2 N}{\varepsilon_0 m_\mathrm{e}}} \tag{5}$$

die Plasmafrequenz. $m_\mathrm{e}$ bedeutet die Elektronenmasse; $\nu_\mathrm{eff}$ gibt die Stoßfrequez, d. h. die mittlere Anzahl der Stöße eines Teilchens an. Die magnetische Permeabilität kann gleich der des freien Raumes gesetzt werden.
Zur Diagnostik eines Plasmas wird dieses von elektromagnetischen Wellen durchstrahlt. Dabei ergibt sich, daß für Frequenzen $f > f_0 = 4{,}5 \cdot 10^9$ Hz das Plasma undurchlässig ist, während niedrigere Frequenzen hindurchgehen. Für Strahlen der Frequenz $f = 10^9$ Hz wird

aus der Messung der Absorption gemäß (1.4./2) auf die spezifische elektrische Leitfähigkeit $\gamma = 0{,}015\ \Omega^{-1}\ \mathrm{m}^{-1}$ geschlossen.
Bestimmen Sie die Konzentration $N$ der positiven oder negativen Ladungsträger und die effektive Stoßfrequenz.

**Lösung:**

Nach (1.4./2) ist

$$\varepsilon' = \varepsilon_0(K_r - \mathrm{i}K_i) = \varepsilon - \mathrm{i}\frac{\gamma}{\omega}. \tag{6}$$

Hieraus folgt

$$\gamma = \varepsilon_0 \omega K_i = \varepsilon_0 \nu_{eff} \frac{\omega_p^2}{\omega^2} \frac{1}{1 + \frac{\nu_{eff}^2}{\omega^2}}. \tag{7}$$

Für die Brechzahl ergibt sich nach (1.4./10) mit $\mu = \mu_0$

$$n = \sqrt{K_r - \frac{K_i^2}{4}}. \tag{8}$$

Die Auslöschung der Wellen mit Frequenzen $f > f_0$ bedeutet, daß die Brechzahl $n$ für $f_0$ gleich Null und für $f > f_0$ komplex wird:

$$n^2 \leqq 0 \qquad \text{für} \qquad f \geqq f_0. \tag{9}$$

Wir setzen

$$\nu_{eff} \ll \omega, \qquad K_i \ll 1 \tag{10}$$

voraus und erhalten damit anstelle von (9)

$$K_r \leqq 0 \qquad \text{bzw.} \qquad \omega = 2\pi f \geqq \omega_p \qquad \text{für} \qquad f \geqq f_0. \tag{11}$$

Die Auslöschung aller Wellen mit Frequenzen $f > f_0$ gibt somit die Möglichkeit zur Bestimmung der Plasmafrequenz $\omega_p$ und damit nach (5) der Konzentration $N$:

$$N = 4\pi^2 f_0^2 \frac{\varepsilon_0 m_e}{e^2}. \tag{12}$$

Mit den vorgegebenen Werten erhalten wir

$$N = 4\pi^2(4{,}5 \cdot 10^9)^2 \cdot \frac{8{,}85 \cdot 10^{-12} \cdot 9{,}11 \cdot 10^{-31}}{(1{,}60 \cdot 10^{-19})^2}\ \mathrm{m}^{-3} = 2{,}5 \cdot 10^{17}\ \mathrm{m}^{-3}.$$

Aus der Bestimmung der elektrischen Leitfähigkeit erhalten wir nach (7) für $\nu_{eff} \ll \omega$

$$\nu_{eff} = \frac{\gamma}{\varepsilon_0} \frac{\omega^2}{\omega_p^2} = \frac{\gamma}{\varepsilon_0} \frac{f^2}{f_0^2}, \tag{13}$$

mit den vorgegebenen Werten

$$\nu_{eff} = \frac{0{,}015}{8{,}85 \cdot 10^{-12}} \frac{1}{4{,}5^2}\ \mathrm{s}^{-1} = 8{,}4 \cdot 10^7\ \mathrm{s}^{-1}.$$

Wie die errechneten Werte zeigen, ist die Voraussetzung (10) im vorliegenden Fall erfüllt.

### 1.4.4. Absorption und Dispersion von Kaliumbromid bei $\lambda = 182$ nm

Für KBr ist die Dispersion nach T. RADHAKRISHNAN durch

$$n^2 = 1{,}4725 + \frac{0{,}6204\,\lambda^2}{\lambda^2 - 0{,}021318 \cdot 10^{-12}} + \frac{0{,}2674\,\lambda^2}{\lambda^2 - 0{,}033124 \cdot 10^{-12}}$$

$$+ \frac{2{,}2847\,\lambda^2}{\lambda^2 - 7365{,}7 \cdot 10^{-12}} \qquad (\lambda \text{ in m})$$

gegeben. Die Absorptionskonstante bei $\lambda = 182$ nm beträgt $9{,}0 \cdot 10^5\ \text{cm}^{-1}$.
Berechnen Sie daraus die Anzahl der Teilchen, bezogen auf einen Kubikmeter, die die Eigenschwingungen mit der Wellenlänge 182 nm ausführen, und bestimmen Sie die mittlere Aufenthaltsdauer eines Energiequants im Oszillator.

**Lösung:**

Nach der DRUDEschen Formel (1.4./28) tritt eine starke Abhängigkeit der Brechzahl von der Frequenz nur in der Umgebung einer Eigenfrequnez $\omega_i$ auf. Wir setzen voraus, daß die Eigenfrequenzen $\omega_i$ so weit auseinanderliegen, daß in erster Näherung für einen Spektralbereich $\Delta\omega$ nur eine der Eigenfrequenzen $\omega_i = \omega_0$ das optische Verhalten deutlich beeinflußt. In der DRUDEschen Formel kann unter dieser Voraussetzung für sämtliche Summanden mit Eigenfrequenzen $\omega_i \neq \omega_0$ ein konstanter Wert benutzt werden. Die Dielektrizitätskonstante wird für Frequenzen im Bereich der Eigenschwingung $\omega_0$ in der Form

$$\varepsilon' = \varepsilon_c' + \Delta\varepsilon' \tag{1}$$

geschrieben, wobei $|\Delta\varepsilon'| \ll |\varepsilon_c'|$ gilt. Damit folgt aus der DRUDEschen Formel

$$\frac{\varepsilon_c' - \varepsilon_0 + \Delta\varepsilon'}{\varepsilon_c' + 2\varepsilon_0 + \Delta\varepsilon'} = \frac{\varepsilon_c' - \varepsilon_0}{\varepsilon_c' + 2\varepsilon_0} + \frac{3\varepsilon_0\,\Delta\varepsilon'}{(\varepsilon_c' + 2\varepsilon_0)^2}\,\Delta\varepsilon'$$

$$= \text{const} + \frac{1}{3\varepsilon_0}\,\frac{N_0 Z_0^2 e^2}{m_0(\omega_0^2 - \omega^2 + \mathrm{i}\varrho_0\omega_0)} \tag{2}$$

und daraus

$$\Delta\varepsilon' = \frac{(\varepsilon_c' + 2\varepsilon_0)^2}{9\varepsilon_0^2}\,\frac{N_0 Z_0^2 e^2}{m_0(\omega_0^2 - \omega^2 + \mathrm{i}\varrho_0\omega_0)} \tag{3}$$

bzw. wegen $\varepsilon_c' + \Delta\varepsilon' = \varepsilon_0(n_c' + \Delta n')^2$

$$\Delta n' = \frac{(n_c'^2 + 2)^2}{18\varepsilon_0 n_c'}\,\frac{N_0 Z_0^2 e^2(\omega_0^2 - \omega^2 - \mathrm{i}\varrho_0\omega_0)}{m_0[(\omega_0^2 - \omega^2)^2 + \varrho_0^2\omega_0^2]}\,. \tag{4}$$

Wir setzen nach (1.4./7)

$$n' = n_c' + \Delta n' = n(1 - \mathrm{i}\varkappa)$$

und nehmen an, daß die Eigenfrequenzen so weit voneinander verschieden sind, daß

$$\varrho_i \ll \frac{|\omega_i^2 - \omega_0^2|}{\omega_i} \tag{5}$$

für sämtliche Werte $i \neq 0$ gilt. Unter dieser Voraussetzung kann man in der Umgebung der Absorptionskante $\omega_0$ die Dämpfung von den anderen Absorptionskanten vernachlässigen und erhält

$$\Delta n' = \Delta n - \mathrm{i} n_c \varkappa \tag{6}$$

nebst

$$n_c' = n_c\,. \tag{6a}$$

Damit folgt aus (4) durch Trennung von Real- und Imaginärteil

$$\Delta n = \frac{(n_c^2 + 2)^2}{18 n_c \varepsilon_0} \frac{N_0 Z_0^2 e^2 (\omega_0^2 - \omega^2)}{m_0[(\omega_0^2 - \omega^2)^2 + \varrho_0^2 \omega_0^2]}, \tag{7}$$

$$\varkappa = \frac{(n_c^2 + 2)^2}{18 n_c^2 \varepsilon_0} \frac{N_0 Z_0^2 e^2 \varrho_0 \omega_0}{m_0[(\omega_0^2 - \omega^2)^2 + \varrho_0^2 \omega_0^2]}. \tag{8}$$

Die Brechzahl ist somit für $\omega > \omega_0$ bzw. $\lambda < \lambda_0 = 2\pi c/\omega_0$ kleiner, für $\omega < \omega_0$ bzw. $\lambda > \lambda_0$ größer als $n_c$. Am Absorptionsmaximum ist $\Delta n = 0$ (vgl. Bild 1.4.1). Diese Form der Abhängigkeit von $\Delta n$ und $\varkappa$ wird als **Lorentzsche Linienform** bezeichnet.

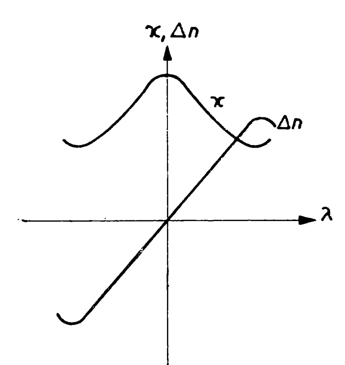



Bild 1.4.1. Brechzahländerung und Absorptionsindex in der Umgebung einer Eigenschwingung

Aus der Messung der Absorptionskonstanten

$$k'' = \frac{2\pi\varkappa}{\lambda}$$

für die Absorptionskante bei $\omega = \omega_0$ folgt aus (8) die Abklingkonstante

$$\varrho_0 = \frac{(n_c^2 + 2)^2}{18 n_c^2 \varepsilon_0} \frac{N_0 Z_0^2 e^2}{m_0 c k''}. \tag{9}$$

Für die Änderung der Brechzahl in der Nähe der Absorptionskante $\omega = \omega_0$ ergibt sich

$$2n_c \, \Delta n = \frac{(n_c^2 + 2)^2 N_0 Z_0^2 e^2 \lambda_0^2 \lambda^2}{36\pi^2 \varepsilon_0 c^2 m_0 (\lambda^2 - \lambda_0^2)}. \tag{10}$$

Für KBr bei 182 nm erhält man aus der Abhängigkeit nach Radhakrishnan

$$n_c^2 = 1{,}4725 + \frac{0{,}6204 \cdot 0{,}182^2}{0{,}182^2 - 0{,}021318} + \frac{2{,}2847 \cdot 0{,}182^2}{0{,}182^2 - 7365{,}7} = 3{,}2131$$

und damit $n = 1{,}793$.
Die Absorptionskante bzw. Spektrallinie im Ultravioletten wird durch oszillierende Elektronen verursacht (vgl. [5] 3.2.). Für $m_0$ ist daher die Elektronenmasse einzusetzen. Aus dem Vergleich von (10) mit dem dritten Summanden nach Radhakrishnan ergibt sich mit $Z = 1$

$$\frac{(n_c^2 + 2)^2 N_0 e^2 \cdot 0{,}033124 \cdot 10^{-12}}{36\pi^2 \varepsilon_0 c^2 m_0} = 0{,}2674.$$

Hierin ist nur $N_0$ unbekannt. Durch Auflösen folgt

$$N_0 = \frac{0{,}2674 \cdot 36\pi^2 \cdot 8{,}85 \cdot 10^{-12} \cdot (3 \cdot 10^8)^2 \cdot 9{,}11 \cdot 10^{-31}}{(1{,}4725^2 + 2)^2 \cdot (1{,}60 \cdot 10^{-19})^2 \cdot 0{,}033124 \cdot 10^{-12}} \text{ m}^{-3} = 4{,}68 \cdot 10^{27} \text{ m}^{-3}$$

als Anzahl der mit der Eigenwellenlänge 182 nm schwingenden Teilchen. KBr hat die Dichte 2,75 g $\text{cm}^{-3}$ und die relative Molekülmasse 119. Ein Kubikmeter Kaliumbromid enthält daher $1{,}4 \cdot 10^{28}$ Moleküle. Von diesen führen rund ein Viertel die betrachtete Eigenschwingung aus. Aus (9) ergibt sich die Abklingkonstante

$$\varrho_0 = \frac{(1{,}4725^2 + 2)^2 \cdot 4{,}68 \cdot 10^{27} \cdot (1{,}60 \cdot 10^{-19})^2}{18 \cdot 1{,}4725^2 \cdot 8{,}85 \cdot 10^{-12} \cdot 9{,}11 \cdot 10^{-31} \cdot 3 \cdot 10^8 \cdot 9{,}0 \cdot 10^7} \text{ s}^{-1}$$

$$= 2{,}45 \cdot 10^{12} \text{ s}^{-1}, \qquad \tau = 4{,}08 \cdot 10^{-13} \text{ s}.$$

### 1.4.5. Fourier-Zerlegung einer gedämpften Schwingung

Die Emission von Licht durch ein Atom erzeuge während eines Zeitabschnitts $\Delta t = 10^{-12}$ s das elektrische Feld

$$E = E_0 \, e^{-\varrho t} \, e^{i\omega_0 t}. \tag{1}$$

Außerhalb dieses Zeitabschnitts sei die Feldstärke gleich Null. Stellen Sie die Schwingung als FOURIER-Reihe dar, durch die das elektrische Feld von der Zeit $t = -\Delta t$ vor Beginn der Lichtemission (die bei $t = 0$ einsetzt) bis zur Zeit $t = \Delta t$ zum Abschluß der Lichtemission exakt wiedergegeben wird. Für die Zeit $t < -\Delta t$ und $t > \Delta t$ werde $E(t)$ periodisch mit der Periode $T = 2\,\Delta t$ fortgesetzt.
Berechnen Sie die FOURIER-Koeffizienten $c_\nu$ für den Spezialfall, daß die Frequenz der $n$-ten Oberschwingung gleich der Frequenz des emittierten Lichtes ist. Wie groß sind die Koeffizienten $c_n$, $c_{n-1}$, $c_{n+1}$?
Für die Rechnung werde $\omega_0 = 2\pi \cdot 10^{14} \text{ s}^{-1}$, $\varrho = 5 \cdot 10^{12} \text{ s}^{-1}$ vorausgesetzt.

**Lösung:**

Jede mit der Periode $T$ periodische Funktion $f(t)$ läßt sich in die FOURIER-Reihe

$$f(t) = \frac{1}{T} \sum_{\nu=-\infty}^{+\infty} c_\nu \, e^{i\omega_\nu t} \tag{2}$$

mit der Grundfrequenz

$$\omega_1 = \frac{2\pi}{T} \tag{3a}$$

und den Oberfrequenzen

$$\omega_\nu = \nu\omega_1 \tag{3b}$$

entwickeln. Die Koeffizienten sind durch

$$c_\nu = \int_{-T/2}^{T/2} f(t) \, e^{-i\omega_\nu t} \, dt \tag{4}$$

bestimmt.

Bezeichnet $t = 0$ den Beginn der Lichtemission, so erstreckt sich eine Periode $T$ von $-\Delta t$ bis $+\Delta t$, wobei

$$f(t) = \begin{cases} 0 & \text{für} \quad -\Delta t \leqq t < 0 \\ e^{-\varrho t}\, e^{i\omega_0 t} & \text{für} \quad 0 \leqq t < \Delta t \end{cases} \tag{5}$$

gilt. Bild 1.4.2. stellt $f(t)$ grafisch dar.

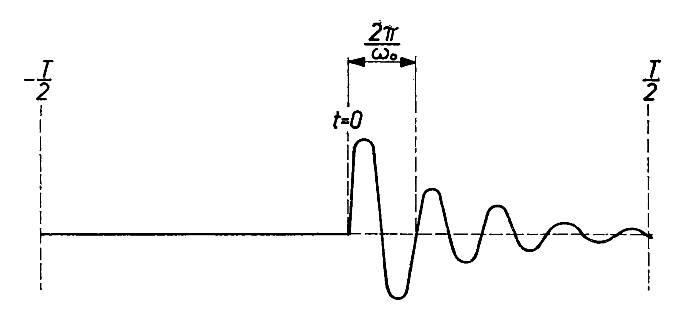



Bild 1.4.2. Gedämpfte Schwingung

Wir setzen $f(t)$ nach (5) in (4) ein und erhalten

$$c_\nu = \int_0^{T/2} e^{-\varrho t}\, e^{i\omega_0 t}\, e^{-i\omega_\nu t}\, dt = \frac{\left[e^{i(\omega_0 - \omega_\nu + i\varrho)}\right]_0^{T/2}}{i(\omega_0 - \omega_\nu + i\varrho)}. \tag{6}$$

Für $t = \frac{T}{2}$ kann die Schwingung als so weit abgeklungen angenommen werden, daß nur die untere Grenze einen Beitrag zum Integral liefert. Die Auswertung des Integrals ergibt

$$c_\nu = \frac{i}{\omega_0 - \omega_\nu + i\varrho} = \frac{\varrho + i(\omega_0 - \omega_\nu)}{(\omega_0 - \omega_\nu)^2 + \varrho^2}. \tag{7}$$

Für das elektrische Feld erhält man

$$E = E_0 \frac{1}{T} \sum_{\nu=-\infty}^{\infty} \frac{\varrho + i(\omega_0 - \omega_\nu)\, e^{-i\omega_\nu t}}{(\omega_0 - \omega_\nu)^2 + \varrho^2}. \tag{8}$$

Realteil und Betrag der FOURIER-Koeffizienten sind nach (7) um so größer, je näher die Frequenz $\omega_\nu = \nu\omega_1$ der Frequenz des emittierenden Atoms liegt.
Im vorliegenden Fall ist $T = 2 \cdot 10^{-10}$ s; die Grundfrequenz der FOURIER-Reihe daher nach (3)

$$\omega = \omega_1 = \frac{2\pi}{T} = \frac{2\pi}{2 \cdot 10^{-10}}\, \mathrm{s}^{-1} = \pi \cdot 10^{10}\, \mathrm{s}^{-1}.$$

Für $n = 2 \cdot 10^4$ folgt $\omega_n = n\pi \cdot 10^{10}\, \mathrm{s}^{-1}$. Es ergibt sich somit aus (7)

$$c_n = c_{20000} = \frac{1}{\varrho} = 2 \cdot 10^{-13}\, \mathrm{s}.$$

Die Koeffizienten der beiden benachbarten FOURIER-Summanden sind

$$c_{\substack{19999\\20001}} = \frac{5 \cdot 10^{12} \pm i \cdot 0{,}01\pi \cdot 10^{12}}{\pi^2 \cdot 10^{20} + 25 \cdot 10^{24}}\,\mathrm{s} = 2 \cdot 10^{-13}(1 - 4\pi^2 \cdot 10^{-6})\,(1 \pm 2i\pi\, 10^{-3})\,\mathrm{s}.$$

In der Nähe des Resonanzmaximums verändert sich der FOURIER-Koeffizient einer Oberschwingung hoher Ordnung hiernach nur geringfügig (vgl. Bild 1.4.3). Die die $c_\nu$-Werte verbindende Kurve ist von der Länge $T$ des Zeitintervalls unabhängig.

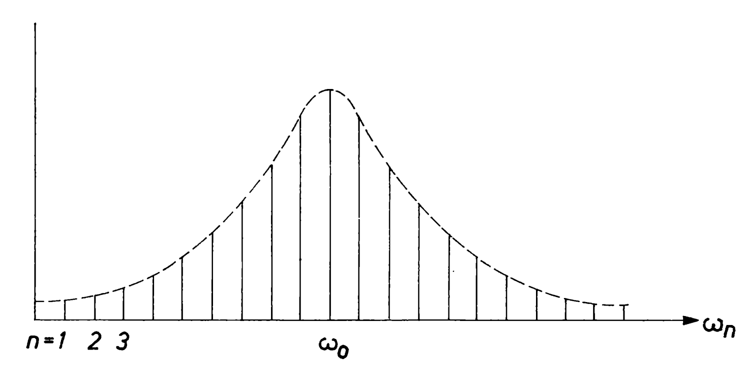



Bild 1.4.3. FOURIER-Koeffizienten $c_n$

## 1.4.6. Fourier-Integral

Durch ein Atom werde über das Zeitintervall $\Delta t$ eine Lichtwelle ausgesandt, die im Empfänger als zeitlich begrenzte, ungedämpfte Schwingung der Form

$$E(t) = \begin{cases} E_0 \sin \omega_0 t & \text{für} \quad 0 \leqq t \leqq \dfrac{2\pi}{\omega_0} N = \Delta t \\ 0 & \text{für} \quad t < 0,\ t > \Delta t \end{cases} \tag{1}$$

wahrgenommen wird. Stellen Sie $E(t)$ durch ein FOURIER-Integral dar und bestimmen Sie den Frequenzbereich, innerhalb dessen der Betrag der FOURIER-Transformierten vom Maximalwert auf die Hälfte absinkt. Führen Sie die Rechnung für $\omega_0 = 2\pi \cdot 10^{14}\,\mathrm{s}^{-1}$, $\Delta t = 10^{-12}\,\mathrm{s}$ durch.

**Lösung:**

Das FOURIER-Integral entsteht aus der FOURIER-Reihe, wenn die Periode $T$ gegen Unendlich geht. Gemäß

$$\frac{c_\nu}{T} \to \tilde{f}(\omega)\,\frac{d\omega}{2\pi} \tag{2}$$

ergibt sich aus der FOURIER-Reihe (1.4.5./2) das FOURIER-Integral

$$\boxed{f(t) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} \tilde{f}(\omega)\, e^{i\omega t}\, d\omega}\,. \tag{3}$$

Die Funktion

$$\boxed{\tilde{f}(\omega) = \int_{-\infty}^{+\infty} f(t)\, e^{-i\omega t}\, dt} \tag{4}$$

heißt **Fourier-Transformierte.**
Wir stellen zunächst

$$f(t) = \begin{cases} -ie^{i\omega_0 t} & \text{für} \quad 0 \leqq t \leqq \Delta t \\ 0 & \text{für} \quad t < 0,\, t > \Delta t \end{cases} \tag{5}$$

als FOURIER-Integral dar. Nach (4) folgt

$$\tilde{f}(\omega) = -i \int_0^{\Delta t} e^{i(\omega_0 - \omega)t}\, dt. \tag{6}$$

Berücksichtigt man $e^{i2\pi N} = 1$, so erhält man aus (6) durch Auswerten des Integrals

$$\tilde{f}(\omega) = \frac{1 - e^{-i2\pi \frac{\omega}{\omega_0} N}}{\omega_0 - \omega}. \tag{7}$$

Ist der Realteil $\operatorname{Re} f(t)$ zu entwickeln, so schreibt man die FOURIER-Reihe nach (1.4.5./2) in der Form

$$\operatorname{Re} f(t) = \frac{1}{T} \operatorname{Re} \left[ c_0 + \sum_{\nu=1}^{\infty} (c_\nu\, e^{i\omega_\nu t} + c_{-\nu}\, e^{-i\omega_\nu t}) \right]. \tag{8}$$

$f(t)^*$ bezeichnet den konjugiert komplexen Wert zu $f(t)$, und es gilt $\operatorname{Re} f(t) = \operatorname{Re} f(t)^*$. Daher kann man in (8) $c_{-\nu}\, e^{-i\omega_\nu t}$ durch $c_{-\nu}^*\, e^{i\omega_\nu t}$ ersetzen. Mit den Definitionen

$$a_0 = \operatorname{Re} c_0, \qquad a_\nu\, e^{-i\beta_\nu} = c_\nu + c_{-\nu}^*, \tag{9}$$

worin $a_\nu$ rein reell, $\nu$ positiv ganzzahlig ist, ergibt sich aus (8)

$$\operatorname{Re} f(t) = \frac{1}{T} \left[ a_0 + \sum_{\nu=1}^{\infty} a_\nu \cos(\omega_\nu t - \beta_\nu) \right]. \tag{10}$$

Im Grenzfall $T \to \infty$ liefert der erste Summand in (10) den Beitrag Null. Es folgt daher aus (10)

$$\operatorname{Re} f(t) = \frac{1}{2\pi} \int_0^{\infty} a(\omega) \cos[\omega t - \beta(\omega)]\, d\omega, \tag{11}$$

aus der zweiten Gleichung (9)

$$a(\omega)\, e^{-i\beta(\omega)} = \tilde{f}(\omega) + \tilde{f}(-\omega)^*. \tag{12}$$

Die FOURIER-Transformierten $\tilde{f}(\omega)$ und $\tilde{f}(\omega)^*$ gehen aus (4) hervor. Im vorliegenden Fall ist

$$\operatorname{Re} f(t) = \begin{cases} \sin \omega_0 t & \text{für} \quad 0 \leqq t \leqq \Delta t, \\ 0 & \text{für} \quad t < 0,\, t > \Delta t. \end{cases} \tag{13}$$

Aus (12) ergibt sich in Verbindung mit (7)

$$a(\omega)\, e^{-i\beta(\omega)} = \frac{1 - e^{-i2\pi N \frac{\omega}{\omega_0}}}{\omega_0 - \omega} + \frac{1 - e^{-i2\pi N \frac{\omega}{\omega_0}}}{\omega_0 + \omega} \tag{14}$$

und daraus

$$a(\omega) = \frac{4N\omega_0}{N^2\omega_0{}^2 - \omega^2} \sin \pi \frac{\omega}{\omega_0}, \qquad \beta(\omega) = \frac{\pi}{2}\left(1 + 2\frac{\omega}{\omega_0}\right). \tag{15}$$

$a(\omega)$ verschwindet, wenn $\omega$ ein Vielfaches von $\omega_0$ annimmt, außer für $\omega = N\omega_0$. In diesem Falle erhält man nach der L'HOSPITALschen Regel als größten Wert des Betrages der FOURIER-Transformierten den Grenzwert

$$4N\omega_0 \left| \lim_{\omega \to N\omega_0} \frac{\sin \pi \frac{\omega}{\omega_0}}{\omega_0{}^2N^2 - \omega^2} \right| = \frac{2\pi}{\omega_0}. \tag{16}$$

Die Kreisfrequenz $\omega$, bei der $|a(\omega)|$ auf die Hälfte gegenüber dem größten Wert nach (16) abgesunken ist, bestimmt sich auf Grund der L'HOSPITALschen Regel aus

$$\frac{\left|\cos \frac{\omega}{\omega_0} \pi\right|}{\omega} = \frac{1}{2N\omega_0}. \tag{17}$$

Wir setzen $N \gg 1$, d. h. $\omega \gg \omega_0$, voraus und schreiben

$$\omega = N\omega_0 + \Delta\omega. \tag{18}$$

Die relative Änderung des Nenners in (17) ist für kleine Werte vernachlässigbar, so daß der Halbwert durch

$$\left|\cos\left(N\pi + \frac{\Delta\omega}{\omega_0}\pi\right)\right| = \frac{1}{2},$$

d. h. durch

$$\Delta\omega = \pm \frac{\omega_0}{6} \tag{19}$$

bestimmt ist. Die Halbwertbreite beträgt $\Delta\omega_{1/2} = 2\,|\Delta\omega| = \frac{\omega_0}{3}$. Das Maximum der FOURIER-Transformierten hat nach (16) den Wert

$$[a(\omega)]_{\max} = \frac{2\pi}{2\pi \cdot 10^{14}}\,\mathrm{s} = 10^{-14}\,\mathrm{s}.$$

Es liegt wegen

$$N = \frac{\Delta t \omega_0}{2\pi} = \frac{10^{-12} \cdot 2\pi \cdot 10^{14}}{2\pi} = 100$$

bei

$$\omega = N\omega_0 = 100 \cdot 2\pi \cdot 10^{14}\,\mathrm{s}^{-1} = 2\pi \cdot 10^{16}\,\mathrm{s}^{-1}.$$

Die Halbwertbreite beträgt

$$\Delta\omega_{1/2} = \frac{2}{3}\pi \cdot 10^{14}\,\mathrm{s}^{-1}.$$

### 1.4.7. Unschärfe der Frequenzbestimmung

Beobachtet wird die Ausstrahlung einer Lichtwelle, deren Frequenz bestimmt werden soll. Hierzu wird das ausgestrahlte Licht auf ein System von Oszillatoren gerichtet. Bei der am stärksten zur Resonanz angeregten Schwingung mit der Kreisfrequenz $\omega_0$ werde die Abklingzeit $\tau = 0{,}5 \cdot 10^{-12}$ s gemessen.

Als Mindestgröße der Ungenauigkeit bei der Frequenzbestimmung hat man die Halbwertbreite des Intensitätsmaximums der Eigenschwingung $\omega_0$ zu setzen. Bestimmen Sie daraus die Ungenauigkeit bei der Frequenzbestimmung des beobachteten Lichtes und schätzen Sie auf Grund der FOURIER-Entwicklung die Mindestgröße des Zeitintervalls der Beobachtung ab.

**Lösung:**

Die auf einen harmonischen Oszillator einwirkende Kraft läßt sich als Überlagerung periodischer Funktionen darstellen:

$$\boldsymbol{F}(t) = \sum_\nu \boldsymbol{F}_\nu(t) = \sum_\nu \boldsymbol{F}_{\nu 0}\, \mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega_\nu t}. \tag{1}$$

Nach (1.4./17) lautet die Bewegungsgleichung für ein erzwingendes System überlagerter harmonischer Wellen

$$m\ddot{\boldsymbol{r}} + m\varrho\dot{\boldsymbol{r}} + m\omega_0^2\boldsymbol{r} = \sum_\nu \boldsymbol{F}_{\nu 0}\, \mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega_\nu t}. \tag{2}$$

Bei der Lösung dieser Bewegungsgleichung beschränken wir uns auf stationäre Zustände, da Eigenschwingungen in Zeiten der Größenordnung $10^{-12}$ s abklingen. Wir gehen demzufolge vom Ansatz

$$\boldsymbol{r}(t) = \sum_\nu \boldsymbol{r}_{\nu 0}\, \mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega_\nu t} \tag{3}$$

aus und erhalten (vgl. 1.4./21)

$$\boldsymbol{r}_{\nu 0} = \frac{\boldsymbol{F}_{\nu 0}}{m(\omega_0^2 - \omega_\nu^2 + \mathrm{i}\varrho_0\omega_\nu)}. \tag{4}$$

Durch den harmonischen Oszillator mit der Eigenschwingung $\omega_0$ wird somit die von außen einwirkende Kraft $F(t)$ in die Kraft

$$m\,\frac{\mathrm{d}^2\boldsymbol{r}(t)}{\mathrm{d}t^2} = m\,\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}t^2}\sum_\nu \frac{\boldsymbol{F}_{\nu 0}\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega_\nu t}}{\omega_0^2 + \omega_\nu^2 + \mathrm{i}\varrho_0\omega_\nu} \tag{5}$$

transformiert.

Setzt sich die äußere Störung $F(t)$ aus Schwingungen zusammen, deren Kreisfrequenzen über den Bereich $\omega \dots \omega + \delta\omega$ gestreut sind, so werden durch den Oszillator diejenigen verstärkt, die in der Nähe einer Eigenschwingung des Oszillators liegen.

Nach (1.4.4./8) ist der Absorptionsindex $\varkappa(\omega)$ in der Umgebung einer Eigenfrequenz $\omega_0$ durch

$$\varkappa(\omega) = \frac{(n_\mathrm{c}^2 + 2)^2}{18 n_\mathrm{c}^2\varepsilon_0}\,\frac{N_0 Z_0^2 e^2\varrho_0\omega_0}{m_\mathrm{e}[(\omega_0^2 - \omega^2)^2 + \varrho_0^2\omega_0^2]} \tag{6}$$

gegeben. Für das Maximum dieser Größe folgt

$$\varkappa_\mathrm{max} = \frac{(n_\mathrm{c}^2 + 2)^2}{18 n_\mathrm{c}^2\varepsilon_0}\,\frac{N_0 Z_0^2 e^2}{m_\mathrm{e}\varrho_0\omega_0}. \tag{7}$$

Die Funktion fällt auf den halben Wert ab, wenn sich in (6) infolge der Veränderlichkeit der Frequenz der Nenner verdoppelt:

$$(\omega_0^2 - \omega^2)^2 = \varrho_0^2\omega_0^2 \tag{8}$$

Hieraus erhält man die Halbwertstellen

$$\omega_{\pm 1/2} = \omega_0\sqrt{1 \mp \frac{\varrho_0}{\omega_0}} \tag{9}$$

bzw. für kleine Werte $\varrho_0 \ll \omega_0$

$$\omega_{\pm 1/2} = \omega_0 \mp \frac{\varrho_0}{2}. \tag{9a}$$

Als Halbwertbreite ergibt sich somit

$$\Delta\omega_{1/2} = \varrho_0. \tag{9b}$$

Daraus folgt für die Ungenauigkeit der Frequenzbestimmung

$$\boxed{\Delta\omega \geqq \Delta\omega_{1/2} = \varrho_0 = \frac{1}{\tau}}. \tag{10}$$

Nach (1.4.5./2) und (1.4.5./3) kann jede Funktion $f(t)$, die in einem Intervall der Länge $\Delta t = T$ beliebig vorgegeben ist, in diesem Intervall durch Überlagerung periodischer Funktionen

$$f(t) = \frac{1}{T} \sum_\nu c_\nu \, \mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}2\pi\nu t}{T}} \tag{11}$$

wiedergegeben werden. Die Oberfrequenzen $\omega_\nu = \nu \frac{2\pi}{T}$ folgen im Abstand

$$\omega_\nu - \omega_{\nu-1} = \frac{2\pi}{T} \tag{12}$$

aufeinander. Für die Ungenauigkeit bei der Frequenzbestimmung folgt daraus

$$\boxed{\Delta\omega \, \Delta t \geqq 2\pi}. \tag{13}$$

Im vorliegenden Fall ergibt sich nach (10) infolge der Eigenschaften des Oszillatorsystems

$$\Delta\omega \geqq \varrho_0 = \frac{1}{0{,}5 \cdot 10^{-12}} \, \mathrm{s}^{-1} = 2 \cdot 10^{12} \, \mathrm{s}^{-1}.$$

Das Zeitintervall für die Beobachtung des Lichtes hat nach (13) mindestens die Größe

$$\Delta t = \frac{2\pi}{2 \cdot 10^{12}} \, \mathrm{s}, \qquad \text{d. h.} \qquad \Delta t \approx 3 \cdot 10^{-12} \, \mathrm{s}.$$



## Aufgaben

A 1.4.1. Ein Plasma mit der Konzentration $N = 5 \cdot 10^{19} \, \mathrm{m}^{-3}$ und der Stoßfrequenz $\nu_{\mathrm{eff}} = 5 \cdot 10^{10} \, \mathrm{s}^{-1}$ wird von einer elektromagnetischen Welle der Frequenz $f = 10^{12}$ Hz durchstrahlt. Bestimmen Sie die Plasmafrequenz, die Brechzahl und die spezifische elektrische Leitfähigkeit.

A 1.4.2. Welche Grenzwerte ergeben sich für $n$ und $\varkappa$ bei einem idealen Leiter?

A 1.4.3. Durch das Plasma können elektromagnetische Wellen nur für $n \geqq 0$ übertragen werden. Untersuchen Sie auf Grund dessen, für welche Konzentrationen die Voraussetzung

$$\lambda \gg \frac{1}{\sqrt[3]{N}}$$

nicht mehr erfüllt ist. Dabei kann $\nu_{\mathrm{eff}} \ll \omega$ angenommen werden.

A 1.4.4. Stellen Sie die Differentialgleichung für einen elektrischen Schwingkreis mit der Kapazität $C$, der Induktivität $L$ und dem elektrischen Widerstand $R$ auf. Untersuchen Sie den Zusammenhang des gedämpften Schwingkreises mit der gedämpften elektromagnetischen Welle. Wie lautet die stationäre Lösung, wenn durch eine äußere Wechselspannungsquelle das Feld $U_0\, e^{i\omega t}$ an den Schwingkreis gelegt wird?

A 1.4.5. LiF hat im Infraroten oberhalb $\lambda = 50\,\mu m$ die nahezu konstante Brechzahl $n_{c\infty} = 3{,}0$. Für $\lambda_1 = 40\,\mu m$ wird $n_1 = 4{,}4$ gemessen. Im Sichtbaren ist die Brechzahl ebenfalls nahezu konstant gleich $n_{c0} = 1{,}4$. Stellen Sie auf Grund dessen die Dispersionsformel für den infraroten Bereich auf.

A 1.4.6. LiF hat für $\lambda = 258$ nm die Brechzahl $n = 1{,}415$ für $\lambda = 300$ nm $n = 1{,}414$. Eine Resonanzstelle tritt im Ultravioletten für $\lambda = 28{,}5$ nm auf. Stellen Sie für den UV-Bereich die Dispersionsformel auf.

A 1.4.7. Im KCNS-Spektrum tritt eine Absorptionslinie bei $\lambda = 183$ nm mit der Halbwertbreite 1 eV auf. Geben Sie die Halbwertbreite in Einheiten der Wellenlänge sowie die Abklingkonstante $\varrho$ und die Abklingzeit $\tau$ an.

A 1.4.8. Berechnen Sie die Breite des Frequenzbereiches, in dem die Absorptionskonstante bei LORENTZscher Linienform auf ein Viertel ihres Maximalwertes abfällt. Untersuchen Sie den Spezialfall schwacher Absorption.

A 1.4.9. F-Zentren (Farbzentren) entstehen in einem Alkalihalogenidkristall durch Bestrahlung mit UV- oder Röntgenlicht. In KCl liegt das Maximum des F-Zentrums bei 563 nm. Die Brechzahl im Maximum der Bandmitte beträgt $n_i = 1{,}66$. Es seien $N = 7{,}2 \cdot 10^{22}\,m^{-3}$ Farbzentren angeregt. Dabei wird die Absorptionskonstante $k = 2\,mm^{-1}$ gemessen. Berechnen Sie die Abklingkonstante $\varrho$ und die maximale Schwankung der Brechzahl im Frequenzbereich um das Resonanzmaximum.

A 1.4.10. In KCl wird als Halbwertbreite des F-Zentrums 0,5 eV gemessen. Berechnen Sie die Abklingkonstante und die Zahl der angeregten F-Zentren.

A 1.4.11. Welche Funktion $y = f(t)$ wird durch die FOURIER-Reihe

$$y = \sum_{\nu=1}^{\infty} (-1)^{\nu-1} \frac{\sin \nu t}{\nu}$$

im Intervall $-\pi \leqq t < \pi$ dargestellt?

A 1.4.12. Entwickeln Sie die Funktionen $y = |t|$ und $y = \operatorname{sign} t$ in eine FOURIER-Reihe.

A 1.4.13. Bestimmen Sie die FOURIER-Transformierte der Funktion

$$y(t) = e^{-\alpha|t|}.$$

A 1.4.14. Berechnen Sie die FOURIER-Transformierte der Funktion

$$y(t) = \begin{cases} A & \text{für} \quad -a \leqq t < a \\ 0 & \text{für} \quad t < -a,\ t \geqq a. \end{cases}$$

A 1.4.15. Welche Funktion wird durch das FOURIER-Integral

$$y = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\omega}{2\pi}\, e^{i\omega t}$$

dargestellt?

A 1.4.16. Die Beobachtung der Ausstrahlung einer Lichtwelle ergibt im Intensitätsmaximum die Abklingzeit 0,1 ns. Welche prinzipielle Ungenauigkeit der Frequenzbestimmung und welcher Mindestwert für die Beobachtungszeit ergeben sich daraus?

## 1.5. Geometrische Optik — Fermatsches Prinzip

### E Einführung

Die geometrische Optik untersucht die Ausbreitung von Lichtwellen, wenn die das Lichtfeld begrenzenden Schirme und Öffnungen groß gegen die Wellenlänge des Lichtes sind. Sie ergibt sich aus der Wellenoptik für den Grenzfall

$$\lambda \to 0. \tag{1}$$

Für die in der geometrischen Optik untersuchten Lichtstrahlen ist das **Fermatsche Prinzip**

$$\boxed{\delta \int_{P_1}^{P_2} n \, ds = 0} \qquad \text{bzw.} \qquad \delta \int_{P_1}^{P_2} \frac{ds}{u} = 0 \tag{2}$$

erfüllt. Es besagt für den allgemeinen Fall einer räumlich veränderlichen Brechzahl $n$ bzw. Phasengeschwindigkeit $u$, daß der Lichtstrahl zwischen zwei Punkten $P_1$ und $P_2$ stets so verläuft, daß der Lichtweg

$$\sum ns \qquad \text{bzw.} \qquad \int_{P_1}^{P_2} n \, ds \tag{3}$$

ein Extremum ist (vgl. Bild 1.5.1). Die für die Lichtausbreitung benötigte Zeit ist ebenfalls ein Extremum (Prinzip der kürzesten Ankunft). (3) wird als optische Weglänge bezeichnet.

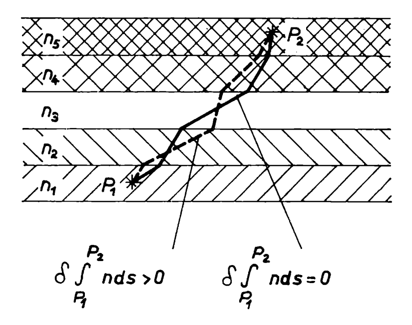



Bild 1.5.1. FERMATsches Prinzip

**Beispiel 1.5.1. Geradlinige Ausbreitung in einem einheitlichen Medium**

In einem einheitlichen Medium ist $n$ konstant. Es gilt daher nach dem FERMATschen Prinzip

$$\delta \int_{P_1}^{P_2} ds = 0.$$

Die Gerade ist die kürzeste Verbindung zwischen zwei Punkten. In einem einheitlichen Medium breitet sich das Licht daher geradlinig aus.

# P Probleme

## 1.5.1. Brechungsgesetz

Leiten Sie aus dem Fermatschen Prinzip das Brechungsgesetz ab.

**Lösung:**

Es sei $P_1PP_2$ der gesuchte Lichtweg nach Bild 1.5.2. Bei einer geringfügigen Verrückung des Punktes $P$ nach $P'$ ergibt sich bis auf Größen zweiter Ordnung als Beziehung zwischen der Verlängerung $\delta s_1$ des Lichtstrahles im Einfallsmedium und der Verkürzung $-\delta s_2$ des Lichtweges im brechenden Medium

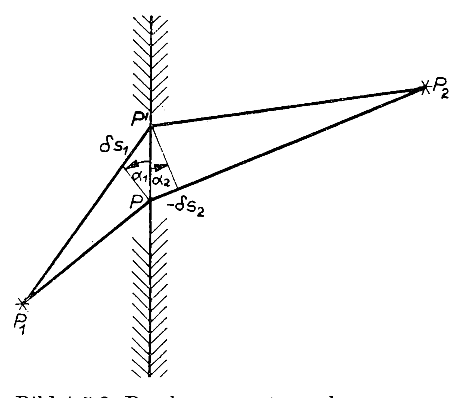
$$\frac{\delta s_1}{\sin \alpha_1} = \frac{-\delta s_2}{\sin \alpha_2} \quad \text{bzw.} \quad \frac{\delta s_1}{\sin \alpha_1} + \frac{\delta s_2}{\sin \alpha_2} = 0. \tag{1}$$

Das Fermatsche Prinzip (1.5./2) erfordert

$$n_1 \delta s_1 + n_2 \delta s_2 = 0. \tag{2}$$

Aus dem Vergleich von (1) und (2) ergibt sich das **Brechungsgesetz**

$$\frac{n_1}{n_2} = \frac{\sin \alpha_1}{\sin \alpha_2}. \tag{3}$$



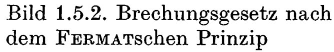



Bild 1.5.2. Brechungsgesetz nach dem Fermatschen Prinzip

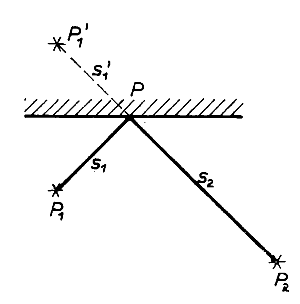



Bild 1.5.3. Reflexion nach dem Fermatschen Prinzip

## 1.5.2. Reflexionsgesetz

Leiten Sie aus dem Fermatschen Prinzip das Reflexionsgesetz ab.

**Lösung:**

Ist $s_1$ der Weg vom Ausgangspunkt $P_1$ zum Spiegel, $s_2$ von dort bis zum Endpunkt $P_2$ (vgl. Bild 1.5.3), so muß nach dem Fermatschen Prinzip (1.5./2)

$$\delta(s_1 + s_2) = 0 \tag{1}$$

gelten.

Anstelle einer Rechnung kann der Lichtweg vom Spiegelpunkt $P_1'$ nach $P_2$ betrachtet werden und damit die Reflexion auf die Lichtausbreitung in einem einheitlichen Medium zurückgeführt werden. Für dieses ist der extremale Lichtweg die gerade Strecke $P_1'P_2'$, die sich aus den beiden Teilstrecken $s_1' = P_1'P$, $s_2 = PP_2$ zusammensetzt. Der reale Weg $P_1P$ ergibt sich aus $P_1'P$ durch Spiegelung.
Das vorliegende Minimum $P_1PP_2$ ist ein relatives Minimum, da die direkte Verbindung $P_1P_2$ kürzer ist.

### 1.5.3. Kollineare Abbildung

Die punktweise Abbildung des Objektraumes auf den Bildraum, durch den alle von einem Punkt ausgehenden Strahlen sich wieder in einem Punkt treffen, wird für nahe der Achse verlaufende Strahlen durch die lineare gebrochene Transformation

$$\left.\begin{aligned} x' &= \frac{a_1x + b_1y + c_1z + d_1}{a_0x + b_0y + c_0z + d_0}, \\ y' &= \frac{a_2x + b_2y + c_2z + d_2}{a_0x + b_0y + c_0z + d_0}, \\ z' &= \frac{a_3x + b_3y + c_3z + d_3}{a_0x + b_0y + c_0z + d_0} \end{aligned}\right\} \tag{1}$$

wiedergegeben. Darin bedeutet $P(x, y, z)$ einen Punkt des Objekt-, $P'(x', y', z')$ einen des Bildraumes. Die Brechzahlen $n$ und $n'$ des Objekt- und des Bildraumes können voneinander verschieden sein. (1) bildet Geraden auf Geraden, Ebenen in Ebenen ab.
Leiten Sie für die axialsymmetrische Abbildung die Abbildungsgesetze ab. Bestimmen Sie die Brennebene des Objektraumes, deren Punkte bei der Abbildung auf die unendlich ferne Ebene des Bildraumes abgebildet werden. Wo liegt die Brennebene des Bildraumes? Formulieren Sie die Abbildungsgesetze unter der Annahme $n = n'$. Wie ist das Bild zu konstruieren?

**Lösung:**

Wir wählen die $z$-Achse als Symmetrieachse. Für die axialsymmetrische Abbildung reicht es aus, einen Meridianschnitt

$$x = 0 \tag{2}$$

zu untersuchen. Für

$$y \to -y \tag{3}$$

muß

$$y' \to -y', \qquad z' \to z' \tag{4}$$

gelten. Das ist allgemein nur für

$$b_0 = 0, \qquad b_3 = 0, \qquad c_2 = 0, \qquad d_2 = 0 \tag{5}$$

möglich. Damit ergibt sich anstelle (1)

$$y' = \frac{b_2y}{c_0z + d_0}, \qquad z' = \frac{c_3z + d_3}{c_0z + d_0}. \tag{6}$$

Die Brennebene des Objektraumes ist daher durch

$$c_0z + d_0 = 0 \tag{7}$$

bestimmt. Wir lösen (6) nach $y$ und $z$ auf:

$$z = \frac{d_0 z' - d_3}{-c_0 z' + c_3}, \qquad y = \frac{(c_3 d_0 - c_0 d_3)\, y'}{(-c_0 z' + c_3)\, b_2}. \tag{8}$$

Die Brennebene im Bildraum ist somit durch

$$c_0 z' - c_3 = 0 \tag{9}$$

gegeben. Wir bezeichnen den Schnitt der objektseitigen Brennebene mit der Symmetrieachse $z = 0$ als objektseitigen Brennpunkt $F$ und wählen ihn als Anfangspunkt des Koordinatensystems $x, y, z$. Die $z$-Achse wird in Strahlrichtung orientiert. Analog wird der bildseitige Brennpunkt $F'$ eingeführt und als Anfangspunkt des $x', y', z'$-Systems gewählt mit $z'$ in Strahlrichtung. Das bedeutet:

$$z = 0 \to z' = \infty \tag{10}$$

und erfordert nach (6)

$$d_0 = 0. \tag{11}$$

Ebenso folgt aus

$$z' = 0 \to z' = -\infty \tag{12}$$

nach (8)

$$c_3 = 0. \tag{11a}$$

Wir setzen

$$\frac{b_2}{c_0} = -f, \qquad \frac{d_3}{b_2} = -f' \tag{13}$$

und erhalten damit aus (6) und (8)

$$\boxed{zz' = ff', \qquad \frac{y'}{y} = -\frac{f}{z} = -\frac{z'}{f'}}. \tag{14}$$

Für $n = n'$ müssen sich nach dem FERMATschen Prinzip für die Abbildung vom Objekt- in den Bildraum die gleichen Gesetze wir für die Abbildung vom Bild- in den Objektraum ergeben. Das erfordert

$$f = -f', \tag{15}$$

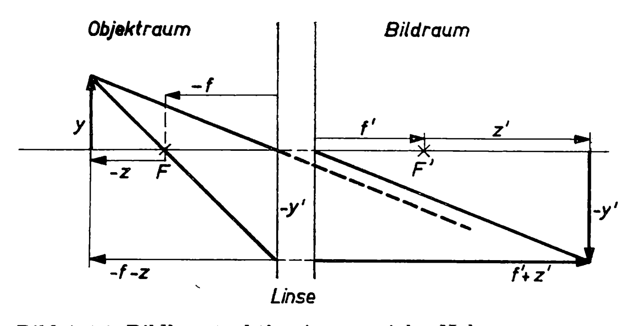



Bild 1.5.4. Bildkonstruktion in paraxialer Näherung

womit aus (14)

$$zz' = -f^2, \qquad \frac{y'}{y} = -\frac{f}{z} = \frac{z'}{f'} \tag{16}$$

folgt. Damit ergibt sich

$$y'z = -fy, \qquad y'f = z'y \tag{17}$$

und durch Addition

$$y'(z + f) = y(z' - f). \tag{18}$$

Berücksichtigt man die Dicke des abbildenden Linsensystems, so folgt damit die Bildkonstruktion nach Bild 1.5.4.



## Aufgaben

A 1.5.1. Nach dem zweiten NEWTONschen Axiom $\boldsymbol{F} = \frac{\mathrm{d}\boldsymbol{p}}{\mathrm{d}t}$ ist die auf ein Massenteilchen wirkende Kraft gleich seiner Impulsänderung. Leiten Sie daraus die Brechzahl von Elektronenstrahlen im elektrischen Feld mit dem Potential $\Phi$ ab, wenn vorausgesetzt wird, daß die Massenveränderlichkeit vernachlässigt werden kann (Grundlage der geometrischen Optik des Elektronenstrahles).

A 1.5.2. Leiten Sie die Brechzahl für Elektronenstrahlen unter Berücksichtigung der relativistischen Massenveränderlichkeit ab.

A 1.5.3. Zwei Medien mit den Brechzahlen $n_1$ und $n_2$ grenzen aneinander. Stellen Sie die Gleichung für die Begrenzungsflächen mit der Eigenschaft auf, daß alle von einem vorgegebenen Punkt $P_1$ im Medium *1* ausgehenden Strahlen so gebrochen werden, daß sie sich in einem vorgegebenen Punkt $P_2$ im Medium *2* treffen.

A 1.5.4. Ein achsensenkrechtes kleines Flächenelement im Medium *1* soll durch ein weitgeöffnetes Strahlenbündel punktweise auf das Medium *2* abgebildet werden. Stellen Sie dafür die Bedingungsgleichung auf. (Bezeichnet $u_1$ den Winkel des abbildenden Strahles gegen die Achse, so kann $\sin u_1$ nicht durch $u_1$ ersetzt werden.)

A 1.5.5. Ein Achsenelement $\mathrm{d}r_1$ soll durch weite Strahlenbündel punktweise abgebildet werden. Stellen Sie dafür die Bedingungsgleichung auf.

A 1.5.6. Durch ein Linsensystem wird der Vergrößerungsmaßstab $\beta = 20$ erzielt, wobei der Öffnungswinkel im Objektraum 35° beträgt. Wie groß darf für $n_1 = n_2$ der Öffnungswinkel im Bildraum sein, wenn noch genähert eine punktweise Wiedergabe eines Flächenelementes orthogonal zur Achse erfolgen soll?

A 1.5.7. Welche Begrenzung ergibt sich für den Öffnungswinkel im Bildraum, wenn auch bei der Tiefenabbildung der vorgegebene Vergrößerungsmaßstab $\beta = 20$ eingehalten werden soll (Daten nach A 1.5.6.)?

A 1.5.8. Mit einer Lupe wird ein Vergrößerungsmaßstab $\beta = 5$ erzielt. Der Öffnungswinkel im Bildraum beträgt 3°. Wie groß darf der Öffnungswinkel im Objektraum sein?

A 1.5.9. Welcher Öffnungswinkel ergibt sich für den Objektraum in A 1.5.8. nach der Tiefenschärfebedingung?

# 2. Reflexion und Brechung des Lichtes an isotropen Medien

## 2.1. Nichtabsorbierende Medien

### E Einführung

*Monochromatisches Licht in homogenen Medien*

Eine monochromatische ebene Lichtwelle stellt eine Idealisierung dar, bei der das Licht nur **eine Frequenz** enthält und die **Wellenfronten eben** sind. Diese Welle wird zeitlich unbegrenzt ausgesendet. Sie ist auch räumlich unbegrenzt.
Physikalisch wird die monochromatische ebene Lichtwelle durch eine Spektralzerlegung angenähert, die nur einen verschwindend kleinen Teil des Spektrums erfaßt und aus einem vorgegebenen Strahlenbündel ein paralleles Strahlensystem aussondert, dessen Breite groß gegenüber der Wellenlänge ist. In diesem Sinne repräsentiert die monochromatische ebene Welle ein Bündel paralleler Strahlen.
Es werden zwei aneinandergrenzende, homogene, isotrope Medien vorausgesetzt. Ein **homogenes Medium** hat makroskopisch in allen Punkten die gleichen physikalischen Eigenschaften; daher kann sich Licht jeder Frequenz ungehindert geradlinig ausbreiten. In einem **isotropen Medium** ist das Verhalten der Lichtwelle für jede Ausbreitungsrichtung gleich, vor allem ist die Phasengeschwindigkeit $u$ von der Ausbreitungsrichtung unabhängig.

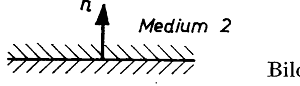



Bild 2.1.1. Orientierung der Flächennormalen $\boldsymbol{n}$ an der Trennebene zwischen zwei Medien *1* und *2*

*Übergangsbedingungen der elektromagnetischen Feldgrößen*

Die Gesetzmäßigkeiten beim Übergang des Lichtes zwischen zwei verschiedenen Medien ergeben sich aus den Lösungen der MAXWELLschen Gleichungen unter Berücksichtigung der Randbedingungen. Danach gelten an der Grenze zwischen den beiden Medien *1* und *2* (Bild 2.1.1) für die Feldvektoren Übergangsbedingungen (vgl. [4] 1.4.). Im folgenden ist die Flächennormale $\boldsymbol{n}$ stets so orientiert, daß sie **in das Medium *2* hinein** weist.

Die Tangentialkomponenten der elektrischen Feldstärke $\boldsymbol{E}$ und die Normalkomponente der magnetischen Flußdichte $\boldsymbol{B}$ sind beim Übergang zwischen zwei Medien stetig:

$$(\boldsymbol{E}_2 - \boldsymbol{E}_1) \times \boldsymbol{n} = 0, \tag{1}$$

$$(\boldsymbol{B}_2 - \boldsymbol{B}_1) \cdot \boldsymbol{n} = 0. \tag{2}$$

Auch die Tangentialkomponenten der magnetischen Feldstärke $\boldsymbol{H}$ gehen zwischen zwei Medien stetig ineinander über, sofern an der Grenze nicht die Stromdichte $\boldsymbol{J}$ über alle Grenzen ansteigt:

$$(\boldsymbol{H}_2 - \boldsymbol{H}_1) \times \boldsymbol{n} = 0. \tag{3}$$

Unendlich große Stromdichten können nur bei idealen elektrischen Leitern auftreten. In diesen wird die elektromagnetische Lichtwelle ausgelöscht. Wellen in idealen Leitern sind daher für optische Untersuchungen höchstens im Rahmen von Grenzwertbetrachtungen von Interesse.
Die Normalkomponente der dielektrischen Verschiebungsdichte $\boldsymbol{D}$ verhält sich unstetig, sofern auf der Übergangsfläche elektrische Ladungen vorhanden sind. Der Unstetigkeitssprung ist gleich der Flächenladungsdichte $\sigma$ (Maßeinheit A s m$^{-2}$):

$$(\boldsymbol{D}_2 - \boldsymbol{D}_1) \cdot \boldsymbol{n} = \sigma. \tag{4}$$

Für die Ableitung der Reflexions- und Brechungsgesetze in homogenen isotropen Medien ist es ausreichend, das Verhalten der Feldgrößen $\boldsymbol{E}$ und $\boldsymbol{H}$ zu untersuchen. Dabei brauchen nur die Übergangsbedingungen (1) und (3) benutzt zu werden. Die anderen beiden Übergangsbedingungen sind auf Grund der linearen Verknüpfungen zwischen den Feldgrößen zusammen mit (1) und (3) erfüllt.

*Reflexionsvermögen und Durchlässigkeit*

Das Bündel einfallender Strahlen mit dem Querschnitt $\Delta A_\mathrm{e}$ in der Einfallsebene wird in ein Bündel reflektierter Strahlen mit dem Querschnitt $\Delta A_\mathrm{r}$ und ein Bündel gebrochener Strahlen mit dem Querschnitt $\Delta A_\mathrm{d}$ zerlegt. Die Lösung der MAXWELLschen Gleichungen unter den vorgegebenen Randbedingungen liefert die Feldgrößen der reflektierten und der gebrochenen Welle im Verhältnis zu denen der einfallenden Welle. Damit läßt sich auch die mittlere **Strahlungsflußdichte**

$$\bar{\boldsymbol{S}} = \overline{\boldsymbol{E} \times \boldsymbol{H}} \tag{5}$$

für die reflektierte und für die gebrochene Welle relativ zur einfallenden Welle bestimmen (vgl. 1.3./12).
Für den zeitlich gemittelten Strahlungsfluß durch eine Fläche $\Delta A$ erhält man

$$\Phi = \bar{\bar{W}} = \bar{\boldsymbol{S}} \cdot \Delta A. \tag{6}$$

Als Reflexionsvermögen $r$ definiert man das Verhältnis zwischen dem Strahlungsfluß der reflektierten und der einfallenden Welle:

$$r = \frac{\Phi_\mathrm{r}}{\Phi_\mathrm{e}} = \frac{S_\mathrm{r}\,\Delta A_\mathrm{r}}{S_\mathrm{e}\,\Delta A_\mathrm{e}}. \tag{7}$$

Analog wird als Durchlässigkeit $d$ das Verhältnis der Strahlungsflüsse von gebrochenem und einfallendem Strahl definiert:

$$d = \frac{\Phi_\mathrm{d}}{\Phi_\mathrm{e}} = \frac{S_\mathrm{d}\,\Delta A_\mathrm{d}}{S_\mathrm{e}\,\Delta A_\mathrm{e}}. \tag{8}$$

$r$ und $d$ sind sowohl vom Einfallswinkel $\alpha$ als auch von der Brechzahl $n_{12}$ zwischen den beiden Medien und von der Polarisation der einfallenden Lichtwelle abhängig. Für den Übergang des Lichtes zwischen zwei Medien gilt der Energiesatz. Daher besteht zwischen $r$ und $d$ stets die Beziehung

$$r + d = 1 \tag{9}$$

(vgl. 2.1.3.).

*Frequenz und Lage der einfallenden, der reflektierten, der gebrochenen Welle*

Das elektrische Feld der ebenen Welle wird nach (1.2./24) und 1.3. in der Form

$$\boldsymbol{E} = \boldsymbol{E}_0\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}(\omega t - \boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r})} \tag{10}$$

dargestellt. Die Übergangsbedingung (1) fordert für jeden durch seinen Ortsvektor $\boldsymbol{r}$ dargestellten Punkt auf der Trennebene, daß für alle Werte $t$ der Zeitvariablen gilt

$$[\boldsymbol{E}_\mathrm{e}\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}(\omega_\mathrm{e}t - \boldsymbol{k}_\mathrm{e}\cdot\boldsymbol{r})} + \boldsymbol{E}_\mathrm{r}\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}(\omega_\mathrm{r}t - \boldsymbol{k}_\mathrm{r}\cdot\boldsymbol{r})}] \times \boldsymbol{n} = \boldsymbol{E}_\mathrm{d}\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}(\omega_\mathrm{d} - \boldsymbol{k}_\mathrm{d}\cdot\boldsymbol{r})} \times \boldsymbol{n}. \tag{11}$$

Darin kennzeichnen $\omega_\mathrm{e}$, $\omega_\mathrm{r}$, $\omega_\mathrm{d}$ die Kreisfrequenzen, $\boldsymbol{k}_\mathrm{e}$, $\boldsymbol{k}_\mathrm{r}$, $\boldsymbol{k}_\mathrm{d}$ die Wellenzahlvektoren, $\boldsymbol{E}_\mathrm{e}$, $\boldsymbol{E}_\mathrm{r}$, $\boldsymbol{E}_\mathrm{d}$ die Amplituden des elektrischen Feldes der einfallenden, der reflektierten, der gebrochenen Welle.
(11) kann für alle Werte der voneinander unabhängigen Variablen $t$ und $\boldsymbol{r}$ nur dann erfüllt sein, wenn die Exponenten sich herausheben. Das erfordert das Bestehen der Gleichungen

$$\omega_\mathrm{e} = \omega_\mathrm{r}, \qquad \omega_\mathrm{e} = \omega_\mathrm{d} \tag{12}$$

nebst

$$\boldsymbol{k}_\mathrm{e}\cdot\boldsymbol{r} = \boldsymbol{k}_\mathrm{r}\cdot\boldsymbol{r}, \qquad \boldsymbol{k}_\mathrm{e}\cdot\boldsymbol{r} = \boldsymbol{k}_\mathrm{d}\cdot\boldsymbol{r}. \tag{13}$$

Die beiden Gleichungen (12) besagen, daß durch Reflexion und Brechung keine Änderung der Frequenz stattfindet.
Aus (13) folgen das Reflexions- und das Snelliussche Brechungsgesetz, wenn man nach den Komponenten der Vektoren auflöst (vgl. 2.1.1.). Legt man den Koordinatenanfangspunkt in die Trennebene, so daß der Ortsvektor $\boldsymbol{r}$ eines beliebigen Punktes der Trennebene in der Trennebene liegt, so steht der Normalenvektor $\boldsymbol{n}$ auf jedem Ortsvektor, für den (13) gilt, senkrecht:

$$\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{r} = 0. \tag{14}$$

$\boldsymbol{n}$ kann als Vektorprodukt zweier beliebiger, aufeinander senkrecht stehender Einheitsvektoren $\boldsymbol{n}_1$ und $\boldsymbol{n}_2$ in der Trennebene dargestellt werden. Bilden $\boldsymbol{n}_1$, $\boldsymbol{n}_2$, $\boldsymbol{n}$ ein Rechtssystem, so läßt sich $\boldsymbol{n}$ gemäß

$$\boldsymbol{n} = \boldsymbol{n}_1 \times \boldsymbol{n}_2 \tag{15}$$

schreiben. Da $\boldsymbol{n}_1$ und $\boldsymbol{n}_2$ spezielle Vektoren $\boldsymbol{r}$ sind, bestehen nach der ersten Gleichung (13) die Beziehungen

$$\boldsymbol{k}_e \cdot \boldsymbol{n}_1 = \boldsymbol{k}_r \cdot \boldsymbol{n}_1, \qquad \boldsymbol{k}_e \cdot \boldsymbol{n}_2 = \boldsymbol{k}_r \cdot \boldsymbol{n}_2. \tag{16}$$

Für das Spatprodukt $(\boldsymbol{k}_r \times \boldsymbol{k}_e) \cdot \boldsymbol{n} = (\boldsymbol{k}_r \times \boldsymbol{k}_e) \times (\boldsymbol{n}_1 \times \boldsymbol{n}_2)$ erhält man nach dem Entwicklungssatz der Vektorrechnung

$$(\boldsymbol{k}_r \times \boldsymbol{k}_e) \cdot \boldsymbol{n} = (\boldsymbol{k}_r \cdot \boldsymbol{n}_1)(\boldsymbol{k}_e \cdot \boldsymbol{n}_2) - (\boldsymbol{k}_r \cdot \boldsymbol{n}_2)(\boldsymbol{k}_e \cdot \boldsymbol{n}_1) \tag{17}$$

und daraus wegen (16)

$$(\boldsymbol{k}_r \times \boldsymbol{k}_e) \cdot \boldsymbol{n} = (\boldsymbol{k}_e \cdot \boldsymbol{n}_1)(\boldsymbol{k}_e \cdot \boldsymbol{n}_2) - (\boldsymbol{k}_e \cdot \boldsymbol{n}_2)(\boldsymbol{k}_e \cdot \boldsymbol{n}_1) = 0, \tag{18}$$

d. h., der reflektierte Strahl liegt in der vom einfallenden Strahl und vom Flächenlot gebildeten Einfallsebene.
In gleicher Weise ergibt sich aus der zweiten Gleichung (13)

$$(\boldsymbol{k}_d \times \boldsymbol{k}_e) \cdot \boldsymbol{n} = 0; \tag{19}$$

d. h., auch der gebrochene Strahl liegt in der Einfallsebene. In den folgenden Untersuchungen über Reflexion und Brechung werden daher nur Strahlen in der Einfallsebene betrachtet.



## Probleme

### 2.1.1. Reflexion und Brechung bei paralleler Polarisation

Linear polarisiertes Licht mit senkrecht zur Einfallsebene schwingendem elektrischem Vektor fällt unter dem Einfallswinkel $\alpha = 35°$ auf eine Glasplatte mit der Brechzahl $n = 1{,}65$. Das Einfallsmedium sei Vakuum. Wie groß sind die Anteile des reflektierten und des gebrochenen Lichtes?

**Lösung:**

Die Begrenzung zwischen den beiden optisch verschiedenen Medien *1* und *2* wird als eben vorausgesetzt. Koordinatenanfangspunkt *0* sei der Punkt, in dem der Lichtstrahl auf die Trennebene fällt (vgl. Bild 2.1.2). Als $x$-Achse eines Cartesischen Koordinatensystems wird die Richtung der Flächennormalen $\boldsymbol{n}$ gewählt.
Der einfallende Strahl spannt zusammen mit der Flächennormalen $\boldsymbol{n}$ die **Einfallsebene** auf. Sie schneidet die **Trennebene** in einer Geraden, die die $y$-Achse kennzeichnet. Die $z$-Achse steht senkrecht auf der $x$- und auf der $y$-Achse, so daß alle drei ein Rechtssystem bilden.
Der in Richtung des einfallenden Strahles im Koordinatenanfangspunkt errichtete Einheitsvektor wird mit $\boldsymbol{n}_e$ bezeichnet. Er liegt im brechenden Medium *2* und in der Einfallsebene. $\boldsymbol{n}$ und $\boldsymbol{n}_e$ schließen den Winkel $\alpha_e$ ein, der gleich dem Einfallswinkel $\alpha$ ist. $\boldsymbol{n}_e$ ist somit im $x, y, z$-System durch die Komponenten

$$\boldsymbol{n}_e = (\cos\alpha, \sin\alpha, 0) \tag{1}$$

bestimmt.
Neben dem einfallenden Strahl werden auf Grund der Erfahrung ein reflektierter und ein gebrochener Strahl angesetzt. Der reflektierte Strahl ist durch den Einheitsvektor

$$\boldsymbol{n}_r = (\cos\alpha_r, \sin\alpha_r, 0), \tag{2}$$

der gebrochene durch

$$\boldsymbol{n}_\mathrm{d} = (\cos \alpha_\mathrm{d}, \sin \alpha_\mathrm{d}, 0) \tag{3}$$

gegeben. $\alpha_\mathrm{r}$ heißt der **Reflexionswinkel,** $\alpha_\mathrm{d}$ der **Brechungswinkel** (vgl. Bild 2.1.2).

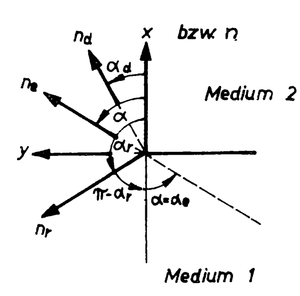



Bild 2.1.2. Die Einheitsvektoren $\boldsymbol{n}_\mathrm{e}$, $\boldsymbol{n}_\mathrm{d}$, $\boldsymbol{n}_\mathrm{r}$ und die zugeordneten Winkel $\alpha = \alpha_\mathrm{e}, \alpha_\mathrm{d}, \alpha_\mathrm{r}$

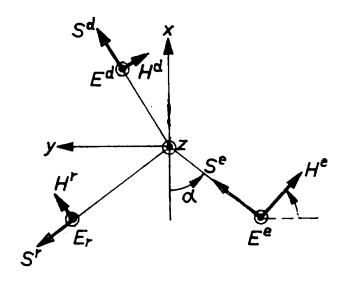



Bild 2.1.3. Die Feldvektoren $\boldsymbol{E}, \boldsymbol{H}, \boldsymbol{S}$ im Falle paralleler Polarisation

Die unbegrenzten ebenen Wellen der betrachteten Strahlen werden nach (1.3.2./2) und (1.3.2./3) durch die folgenden Feldgrößen charakterisiert (vgl. auch Bild 2.1.3):

einfallende Welle:

$$\left.\begin{aligned} E_z^\mathrm{e} &= E_0 \exp \mathrm{i}[\omega t - k_1(x \cos \alpha + y \sin \alpha)], \\ H_x^\mathrm{e} &= \sqrt{\frac{\varepsilon_1}{\mu_1}}\, E_0 \sin \alpha \exp \mathrm{i}[\omega t - k_1(x \cos \alpha + y \sin \alpha)], \\ H_y^\mathrm{e} &= -\sqrt{\frac{\varepsilon_1}{\mu_1}}\, E_0 \cos \alpha \exp \mathrm{i}[\omega t - k_1(x \cos \alpha + y \sin \alpha)]; \end{aligned}\right\} \tag{4}$$

reflektierte Welle:

$$\left.\begin{aligned} E_z^\mathrm{r} &= R_\mathrm{p} E_0 \exp \mathrm{i}[\omega t - k_1(x \cos \alpha_\mathrm{r} + y \sin \alpha_\mathrm{r})], \\ H_x^\mathrm{r} &= R_\mathrm{p} \sqrt{\frac{\varepsilon_1}{\mu_1}}\, E_0 \sin \alpha_\mathrm{r} \exp \mathrm{i}[\omega t - k_1(x \cos \alpha_\mathrm{r} + y \sin \alpha_\mathrm{r})], \\ H_y^\mathrm{r} &= -R_\mathrm{p} \sqrt{\frac{\varepsilon_1}{\mu_1}}\, E_0 \cos \alpha_\mathrm{r} \exp \mathrm{i}[\omega t - k_1(x \cos \alpha_\mathrm{r} + y \sin \alpha_\mathrm{r})]; \end{aligned}\right\} \tag{5}$$

gebrochene Welle:

$$\left.\begin{aligned} E_z^\mathrm{d} &= D_\mathrm{p} E_0 \exp \mathrm{i}[\omega t - k_2(x \cos \alpha_\mathrm{d} + y \sin \alpha_\mathrm{d})], \\ H_x^\mathrm{d} &= D_\mathrm{p} \sqrt{\frac{\varepsilon_2}{\mu_2}}\, E_0 \sin \alpha_\mathrm{d} \exp \mathrm{i}[\omega t - k_2(x \cos \alpha_\mathrm{d} + y \sin \alpha_\mathrm{d})], \\ H_y^\mathrm{d} &= -D_\mathrm{p} \sqrt{\frac{\varepsilon_2}{\mu_2}}\, E_0 \cos \alpha_\mathrm{d} \exp \mathrm{i}[\omega t - k_2(x \cos \alpha_\mathrm{d} + y \sin \alpha_\mathrm{d})]. \end{aligned}\right\} \tag{6}$$

Nichtaufgeführte Komponenten sind gleich Null.

$R_p$ bedeutet die relative Amplitude der reflektierten Welle bei paralleler Polarisation bzw. senkrecht zur Einfallsebene schwingendem elektrischem Vektor. $D_p$ gibt die zugeordnete relative Amplitude der gebrochenen Welle an. Die Wellenzahlen sind für die beiden aneinandergrenzenden Medien verschieden.
An der Trennebene $x = 0$ müssen die Tangentialkomponenten nach (2.1./1) und (2.1./3) übereinstimmen. Das erfordert für das elektrische Feld das Bestehen der Gleichung

$$\boldsymbol{E}_z{}^{\mathrm{e}} + \boldsymbol{E}_z{}^{\mathrm{r}} = \boldsymbol{E}_z{}^{\mathrm{d}} \qquad (\text{gültig für } x = 0), \tag{7}$$

für das magnetische Feld

$$\boldsymbol{H}_y{}^{\mathrm{e}} + \boldsymbol{H}_y{}^{\mathrm{r}} = \boldsymbol{H}_z{}^{\mathrm{d}} \qquad (\text{gültig für } x = 0). \tag{8}$$

Diese beiden Gleichungen können nur dann in allen Punkten der Trennebene $x = 0$ erfüllt sein, wenn hier ihre Exponenten übereinstimmen. Diese Forderung bedeutet nach (4) und (5)

$$\sin \alpha = \sin \alpha_{\mathrm{r}}. \tag{9}$$

Nach (4) und (6) folgt

$$k_1 \sin \alpha = k_2 \sin \alpha_{\mathrm{d}}. \tag{10}$$

Mit (9) wird das

$$\boxed{\text{Reflexionsgesetz } \alpha_{\mathrm{r}} = \pi - \alpha} \tag{11}$$

zum Ausdruck gebracht. Die Lösung $\alpha_{\mathrm{r}} = \alpha$ würde eine auf das einfallende Feld sich überlagernde Welle mit der gleichen Ausbreitungsrichtung ergeben und kann von den weiteren Betrachtungen ausgeschlossen werden. $\pi - \alpha_{\mathrm{r}}$ ist der Reflexionswinkel, der gleich dem Einfallswinkel ist. (10) liefert das

$$\boxed{\text{Brechungsgesetz } \frac{\sin \alpha}{\sin \alpha_{\mathrm{d}}} = \frac{k_2}{k_1} = n_{12}}\,. \tag{12}$$

Wir setzen die Wellenzahlen gemäß (1.3./24) ein und erhalten als Brechzahl $n_{12}$ der Medien *1* und *2*

$$\boxed{\frac{\sin \alpha}{\sin \alpha_{\mathrm{d}}} = n_{12} = \sqrt{\frac{\varepsilon_2 \mu_2}{\varepsilon_1 \mu_1}}}\,. \tag{13}$$

Ist das Einfallsmedium Vakuum, so können wir für $\varepsilon_1$ und $\mu_1$ die Feldkonstanten $\varepsilon_0$ und $\mu_0$ einsetzen sowie $\varepsilon_2 = \varepsilon$, $\mu_2 = \mu$ schreiben. Für $n_{12}$ ergibt sich damit die **Brechzahl** $n$ des Mediums

$$n = \sqrt{\frac{\varepsilon \mu}{\varepsilon_0 \mu_0}} = \frac{c}{v}, \tag{14}$$

worin $v$ die Lichtgeschwindigkeit im Medium, $c$ die im Vakuum kennzeichnen. Da nichtabsorbierende ferromagnetische Stoffe unbekannt sind, kann man $\mu = \mu_0$ setzen und erhält die

$$\boxed{\text{MAXWELLsche Beziehung } n = \sqrt{\frac{\varepsilon}{\varepsilon_0}} = \sqrt{\varepsilon_{\mathrm{rel}}}}\,. \tag{15}$$

Definiert man

$$n_i = \sqrt{\frac{\varepsilon_i \mu_i}{\varepsilon_0 \mu_0}},$$

so kann die Brechzahl zwischen den Medien *1* und *2* auch in der Form

$$n_{12} = \frac{n_2}{n_1}$$

geschrieben werden.

Wir setzen (11) und (13) in die Randbedingungen (7) und (8) ein. In Verbindung mit den Gleichungen (4) bis (6) folgt aus (7)

$$1 + R_p = D_p \tag{16}$$

und, wenn man $\cos \alpha_r = -\cos \alpha$ berücksichtigt, aus (8)

$$(1 - R_p) \sqrt{\frac{\varepsilon_1}{\mu_1}} \cos \alpha = D_p \sqrt{\frac{\varepsilon_2}{\mu_2}} \cos \alpha_d . \tag{17}$$

Der Brechungswinkel $\alpha_d$ läßt sich mit Hilfe des Brechungsgesetzes (13) ausdrücken. Damit folgt durch Auflösen des aus (16) und (17) gebildeten Gleichungssystems

$$R_p = \frac{\cos \alpha - \frac{\mu_1}{\mu_2} \sqrt{n_{12}^2 - \sin^2 \alpha}}{\cos \alpha + \frac{\mu_1}{\mu_2} \sqrt{n_{12}^2 - \sin^2 \alpha}}, \tag{18}$$

$$D_p = \frac{2 \cos \alpha}{\cos \alpha + \frac{\mu_1}{\mu_2} \sqrt{n_{12}^2 - \sin^2 \alpha}} . \tag{19}$$

$\mu_2$ kann gleich $\mu_1$ gesetzt werden.

Mit den vorgegebenen Werten erhalten wir aus $\cos 35° = 0{,}819$, $\sin 35° = 0{,}574$

$$R_p = \frac{0{,}819 - \sqrt{1{,}65^2 - 0{,}574^2}}{0{,}819 + \sqrt{1{,}65^2 - 0{,}574^2}} = -0{,}308,$$

$$D_p = \frac{2 \cdot 0{,}819}{0{,}819 + \sqrt{1{,}65^2 - 0{,}574^2}} = 0{,}692 .$$

Das negative Vorzeichen bei $R_p$ kennzeichnet eine Phasenverschiebung $\pi$ der reflektierten gegen die einfallende Welle.

Die Intensität ist dem Quadrat des Betrages der Amplitude proportional. Für den relativen Anteil der reflektierten Strahlung folgt

$$r_p = |R_p|^2 = 0{,}308^2 = 0{,}095 .$$

Der Anteil $d_p = 1 - r_p = 0{,}905$ der Strahlung wird in das zweite Medium gebrochen.

## 2.1.2. Reflexion und Brechung bei orthogonaler Polarisation

Auf eine Glasplatte mit der Brechzahl $n = 1{,}65$ falle unter dem Einfallswinkel $\alpha = 35°$ linear polarisiertes Licht mit parallel zur Einfallsebene schwingendem elektrischem Vektor. Als Einfallsmedium werde Vakuum angenommen. Berechnen Sie die energetischen Anteile des reflektierten und des gebrochenen Lichtes.

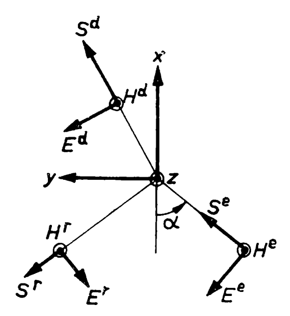



Bild 2.1.4. Die Feldvektoren $\boldsymbol{E}$, $\boldsymbol{H}$, $\boldsymbol{S}$ im Falle orthogonaler Polarisation

**Lösung:**

Nach (1.3.3./2) und (1.3.3./3) setzen wir für das elektromagnetische Feld der einfallenden Welle (vgl. Bild 2.1.4)

$$\left.\begin{aligned} E_x{}^{\mathrm{e}} &= -E_0 \sin\alpha \exp \mathrm{i}[\omega t - k_1(x\cos\alpha + y\sin\alpha)], \\ E_y{}^{\mathrm{e}} &= E_0 \cos\alpha \exp \mathrm{i}[\omega t - k_1(x\cos\alpha + y\sin\alpha)], \\ H_z{}^{\mathrm{e}} &= \sqrt{\frac{\varepsilon_1}{\mu_1}}\, E_0 \exp \mathrm{i}[\omega t - k_1\,(x\cos\alpha + y\sin\alpha)]\,; \end{aligned}\right\} \tag{1}$$

der reflektierten Welle

$$\left.\begin{aligned} E_x{}^{\mathrm{r}} &= -R_{\mathrm{s}}E_0 \sin\alpha_{\mathrm{r}} \exp \mathrm{i}[\omega t - k_1(x\cos\alpha_{\mathrm{r}} + y\sin\alpha_{\mathrm{r}})], \\ E_y{}^{\mathrm{r}} &= R_{\mathrm{s}}E_0 \cos\alpha_{\mathrm{r}} \exp \mathrm{i}[\omega t - k_1(x\cos\alpha_{\mathrm{r}} + y\sin\alpha_{\mathrm{r}})], \\ H_z{}^{\mathrm{r}} &= R_{\mathrm{s}} \sqrt{\frac{\varepsilon_1}{\mu_1}}\, E_0 \exp \mathrm{i}[\omega t - k_1(x\cos\alpha_{\mathrm{r}} + y\sin\alpha_{\mathrm{r}})] \end{aligned}\right\} \tag{2}$$

und der gebrochenen Welle

$$\left.\begin{aligned} E_x{}^{\mathrm{d}} &= -D_{\mathrm{s}}E_0 \sin\alpha_{\mathrm{d}} \exp \mathrm{i}[\omega t - k_2(x\cos\alpha_{\mathrm{d}} + y\sin\alpha_{\mathrm{d}})], \\ E_y{}^{\mathrm{d}} &= D_{\mathrm{s}}E_0 \cos\alpha_{\mathrm{d}} \exp \mathrm{i}[\omega t - k_2(x\cos\alpha_{\mathrm{d}} + y\sin\alpha_{\mathrm{d}})], \\ H_z{}^{\mathrm{d}} &= D_{\mathrm{s}} \sqrt{\frac{\varepsilon_2}{\mu_2}}\, E_0 \exp \mathrm{i}[\omega t - k_2(x\cos\alpha_{\mathrm{d}} + y\sin\alpha_{\mathrm{d}})]. \end{aligned}\right\} \tag{3}$$

Für die Trennebene $x = 0$ ergeben sich nach (2.1./1) und (2.1./3) die Grenzbedingungen

$$E_y{}^{\mathrm{e}} + E_y{}^{\mathrm{r}} = E_y{}^{\mathrm{d}} \qquad \text{(gültig für } x = 0) \tag{4}$$

nebst

$$H_z{}^{\mathrm{e}} + H_z{}^{\mathrm{r}} = H_z{}^{\mathrm{d}} \qquad \text{(gültig für } x = 0). \tag{5}$$

Durch Einsetzen des Reflexionsgesetzes (2.1.1./11) und des Brechungsgesetzes (2.1.1./12) folgen daraus die beiden Gleichungen

$$(1 - R_s)\, n_{12} \cos\alpha = D_s \sqrt{n_{12}^2 - \sin^2\alpha}, \tag{6}$$

$$(1 + R_s) \qquad = D_s n_{12} \frac{\mu_2}{\mu_1}. \tag{7}$$

Durch Auflösen dieses Gleichungssystems ergibt sich

$$R_s = \frac{\frac{\mu_1}{\mu_2}\, n_{12}^2 \cos\alpha - \sqrt{n_{12}^2 - \sin^2\alpha}}{\frac{\mu_1}{\mu_2}\, n_{12}^2 \cos\alpha + \sqrt{n_{12}^2 - \sin^2\alpha}}, \tag{8}$$

$$D_s = \frac{2 n_{12} \cos\alpha}{\frac{\mu_1}{\mu_2}\, n_{12}^2 \cos\alpha + \sqrt{n_{12}^2 - \sin^2\alpha}}. \tag{9}$$

Mit den vorgegebenen Werten erhalten wir

$$R_s = \frac{1{,}65^2 \cdot 0{,}819 - \sqrt{1{,}65^2 - 0{,}574^2}}{1{,}65^2 \cdot 0{,}819 + \sqrt{1{,}65^2 - 0{,}574^2}} = 0{,}18,$$

$$D_s = \frac{2 \cdot 1{,}65 \cdot 0{,}819}{1{,}65^2 \cdot 0{,}819 + \sqrt{1{,}65^2 - 0{,}574^2}} = 0{,}715.$$

Für die Anteile des reflektierten und des gebrochenen Lichtes folgt

$$r_s = R_s{}^2 = 0{,}032, \qquad d_s = 1 - r_s = 0{,}968.$$

Die in 2.1.1. und 2.1.2. abgeleiteten Formel für die Amplitude der reflektierten und der gebrochenen Welle heißen **Fresnelsche Formeln.**

## 2.1.3. Reflexions- und Brechungsvermögen bei beliebiger Polarisation

Beweisen Sie allgemein, daß bei der Reflexion und Brechung eines Strahles der Energiesatz erfüllt ist. Stellen Sie die Formel für das Reflexions- und für das Brechungsvermögen auf. Welchen Wert haben diese beiden Größen für einen unter dem Winkel $\alpha = 35°$ aus Luft auf eine Glasplatte fallenden Lichtstrahl, wenn die Brechzahl durch $n_{12} = 1{,}65$ gegeben ist und das linear polarisiert einfallende Licht unter dem Winkel $\varphi = 30°$ gegen die Einfallsebene schwingt?

**Lösung:**

Nach dem Reflexionsgesetz (2.1.1./11) hat der reflektierte Strahl den gleichen Querschnitt wie der einfallende:

$$\Delta A_r = \Delta A_e. \tag{1a}$$

Dagegen ergibt sich für den Querschnitt des gebrochenen Strahles auf Grund des Brechungsgesetzes (2.1.1./12)

$$\Delta A_d = \Delta A_e \frac{\cos\alpha_d}{\cos\alpha} \tag{1b}$$

(vgl. Bild 2.1.5).

Die Größe

$$\bar{S} = \overline{\boldsymbol{E} \times \boldsymbol{H}} = \sqrt{\frac{\varepsilon}{\mu}}\, \overline{\boldsymbol{E}^2} \tag{2}$$

gibt die zeitlich gemittelte Strahldichte an. Für den zeitlich gemittelten Strahlungsfluß der drei gebrochenen Wellen erhalten wir

$$\bar{W}_e = \bar{S}_e\, \Delta A_e = \sqrt{\frac{\varepsilon_1}{\mu_1}}\, \overline{E_e^2}\, \Delta A, \tag{3a}$$

$$\bar{W}_r = \bar{S}_r\, \Delta A_r = \sqrt{\frac{\varepsilon_1}{\mu_1}}\, R^2 \overline{E_e^2}\, \Delta A, \tag{3b}$$

$$\bar{W}_d = \bar{S}_d\, \Delta A_d = \sqrt{\frac{\varepsilon_2}{\mu_2}}\, D^2 \overline{E_e^2}\, \frac{\cos \alpha_d}{\cos \alpha}\, \Delta A. \tag{3c}$$

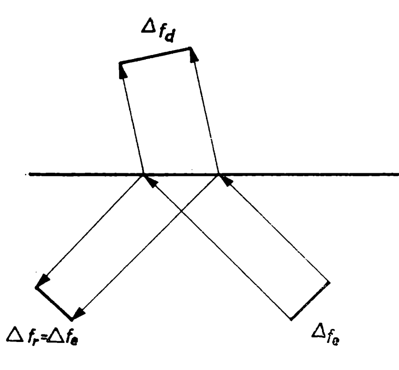



Bild 2.1.5. Strahlquerschnitte beim Übergang zwischen verschiedenen Medien. Die Querschnitte $\Delta f_e$, $\Delta f_r$, $\Delta f_d$ sind den Flächen $\Delta A_e$, $\Delta A_r$, $\Delta A_d$ proportional

$RE_e$ gibt die Amplitude der reflektierten, $DE_e$ die der gebrochenen Welle an. Für das Reflexionsvermögen folgt

$$r = \frac{\bar{W}_r}{\bar{W}_e} = R^2. \tag{4a}$$

Beim gebrochenen Strahl erhält man unter Benutzung des Brechungsgesetzes (2.1.1./12), der Beziehung (2.1.1./13) und der Gleichung (1b)

$$d = \frac{\bar{W}_d}{\bar{W}_e} = \frac{\mu_1}{\mu_2}\, D^2\, \frac{\sqrt{n_{12}^2 - \sin^2 \alpha}}{\cos \alpha}. \tag{4b}$$

Zerlegt man jede der drei Wellen in einen parallel und einen orthogonal polarisierten Anteil, ergibt sich nach (2.1.1./18) und (2.1.1./19) für den parallel polarisierten Anteil

$$r_p = R_p^2 = \frac{\left(\cos \alpha - \frac{\mu_1}{\mu_2} \sqrt{n_{12}^2 - \sin^2 \alpha}\right)^2}{\left(\cos \alpha + \frac{\mu_1}{\mu_2} \sqrt{n_{12}^2 - \sin^2 \alpha}\right)^2}, \tag{5a}$$

$$d_p = \frac{\mu_1}{\mu_2}\, D_p^2\, \frac{\sqrt{n_{12}^2 - \sin^2 \alpha}}{\cos \alpha} = \frac{4 \frac{\mu_1}{\mu_2} \sqrt{n_{12}^2 - \sin^2 \alpha}\, \cos \alpha}{\left(\cos \alpha + \frac{\mu_1}{\mu_2} \sqrt{n_{12}^2 - \sin^2 \alpha}\right)^2}. \tag{5b}$$

Wie man sich überzeugt, besteht die Beziehung

$$r_p + d_p = 1. \tag{5c}$$

Für den orthogonal polarisierten Anteil erhält man nach (2.1.2./8) und (2.1.2./9)

$$r_s = R_s{}^2 = \frac{\left(\frac{\mu_1}{\mu_2} n_{12}^2 \cos\alpha - \sqrt{n_{12}^2 - \sin^2\alpha}\right)^2}{\left(\frac{\mu_1}{\mu_2} n_{12}^2 \cos\alpha + \sqrt{n_{12}^2 - \sin^2\alpha}\right)^2}, \tag{6a}$$

$$d_s = \frac{\mu_1}{\mu_2} D_s{}^2 \frac{\sqrt{n_{12}^2 - \sin^2\alpha}}{\cos\alpha} = \frac{\mu_1}{\mu_2} \frac{4n_{12}^2 \cos\alpha \sqrt{n_{12}^2 - \sin^2\alpha}}{\left(\frac{\mu_1}{\mu_2} n_{12}^2 \cos\alpha + \sqrt{n_{12}^2 - \sin^2\alpha}\right)^2}. \tag{6b}$$

Auch hier erkennt man das Bestehen der Beziehung

$$r_s + d_s = 1. \tag{6c}$$

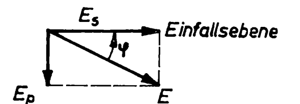



Bild 2.1.6. Elektrischer Vektor $\boldsymbol{E}$, unter dem Winkel $\varphi$ gegen die Einfallsebene geneigt

Ist der elektrische Vektor $\boldsymbol{E}_e$ des einfallenden Strahles unter dem Winkel $\varphi$ gegen die Einfallsebene geneigt, so besteht zwischen den parallel und den orthogonal polarisierten Komponenten des elektrischen Feldes die Beziehung

$$\frac{E_s}{E_p} = \cot\varphi \tag{7}$$

(vgl. Bild 2.1.6). Die Amplitude des einfallenden elektrischen Feldes ist durch

$$E_e = \sqrt{E_s{}^2 + E_p{}^2} = E_p \sqrt{1 + \cot^2\varphi} \tag{8}$$

gegeben. Für die Amplitude der reflektierten Welle folgt

$$RE_e = \sqrt{R_s{}^2 E_s{}^2 + R_p{}^2 E_p{}^2} = E_p \sqrt{R_p{}^2 + R_s{}^2 \cot^2\varphi} \tag{9}$$

und damit für das Reflexionsvermögen

$$r = R^2 = R_p{}^2 \sin^2\varphi + R_s{}^2 \cos^2\varphi = r_p \sin^2\varphi + r_s \cos^2\varphi. \tag{10}$$

In gleicher Weise ergibt sich für das Durchlassungsvermögen

$$d = \frac{\mu_1}{\mu_2} \frac{\sqrt{n_{12}^2 - \sin^2\alpha}}{\cos\alpha} (D_p{}^2 \sin^2\varphi + D_s{}^2 \cos^2\varphi). \tag{11}$$

Mit den vorgegebenen Werten erhalten wir unter Berücksichtigung der Zwischenergebnisse in 2.1.1. und 2.1.2.

$$r = 0{,}095 \cdot 0{,}25 + 0{,}032 \cdot 0{,}75 = 0{,}048,$$

$$d = 1 - r = 0{,}952.$$

Die magnetischen Permeabilitäten sind als gleich angenommen.

### 2.1.4. Malus-Brewstersches Gesetz

Natürliches Licht fällt aus einer Glasplatte mit der Brechzahl $n_1 = 1{,}7$ auf eine Lösung, deren Brechzahl $n_2$ von der Konzentration des Lösungsmittels abhängt. Der Einfallswinkel sei $\alpha = 40°$. Untersuchen Sie, für welche Brechzahl $n_2$ das reflektierte Licht linear polarisiert ist. Berechnen Sie das Reflexionsvermögen des natürlichen Lichtes, wenn dieses unter dem Winkel $\alpha = 40° \pm 0{,}1°$ einfällt. Dabei kann $\mu_1 = \mu_2$ vorausgesetzt werden.

**Lösung:**

Soll die Lichtwelle durch Reflexion linear polarisiert werden, so muß entweder die Komponente mit parallel oder die mit senkrecht zur Einfallsebene schwingendem elektrischem Vektor beseitigt werden. Für die Komponente mit senkrecht zur Einfallsebene schwingendem elektrischem Vektor würde das nach (2.1.1./18)

$$\cos\alpha = \sqrt{n_{12}^2 - \sin^2\alpha} \tag{1}$$

bedeuten. Diese Gleichung ist nur für

$$n_{12} = 1 \tag{2}$$

zu erfüllen.
Dagegen ergibt sich für die Komponenten mit parallel zur Einfallsebene schwingendem elektrischem Vektor nach (2.1.2./8)

$$n_{12}^2 \cos\alpha = \sqrt{n_{12}^2 - \sin^2\alpha}\,. \tag{3}$$

Diese Gleichung wird für $\alpha = \alpha_{\text{pol}}$ mit

$$\sin\alpha_{\text{pol}} = \frac{n_{12}}{\sqrt{n_{12}^2 + 1}} \quad \text{bzw.} \quad \tan\alpha_{\text{pol}} = n_{12} \tag{4}$$

erfüllt. Für den Polarisationswinkel

$$\boxed{\alpha_{\text{pol}} = \arctan n_{12}} \tag{5}$$

ist das reflektierte Licht linear polarisiert. Der elektrische Vektor schwingt senkrecht zur Einfallsebene:

$$\boxed{R_{\text{p}}(\alpha_{\text{pol}}) = 0}\,. \tag{6}$$

Nach dem Brechungsgesetz (2.1.1./12) folgt für $\alpha = \alpha_{\text{pol}}$

$$\sin\alpha_{\text{d}} = \frac{\sin\alpha_{\text{pol}}}{n_{12}} = \frac{1}{\sqrt{n_{12}^2 + 1}}, \qquad \cos\alpha_{\text{d}} = \frac{1}{\sqrt{n_{12}^2 + 1}}, \tag{7}$$

nach dem Reflexionsgesetz (2.1.1./11)

$$\sin\alpha_{\text{r}} = \sin\alpha_{\text{pol}} = \frac{n_{12}}{\sqrt{n_{12}^2 + 1}}, \qquad \cos\alpha_{\text{r}} = -\cos\alpha = -\frac{1}{\sqrt{n_{12}^2 + 1}}. \tag{8}$$

Daraus ergibt sich

$$\boldsymbol{n}_{\text{d}} \cdot \boldsymbol{n}_{\text{r}} = \frac{1}{n_{12}^2 + 1}(n_{12}, 1, 0) \cdot (-1, n_{12}, 0) = 0. \tag{9}$$

Reflektierter und gebrochener Strahl stehen für $\alpha = \alpha_{pol}$ aufeinander senkrecht (**Brewstersches Gesetz**, vgl. Bild 2.1.7). Im betrachteten Fall $\alpha = 40°$ tritt lineare Polarisation für

$$n_{12} = \frac{n_2}{n_1} = \tan \alpha = 0{,}839,$$

d. h. wegen $n_1 = 1{,}7$ für

$$n_2 = 0{,}839 \cdot 1{,}7 = 1{,}426$$

auf.

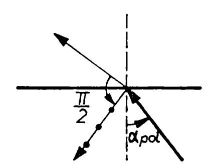



Bild 2.1.7. Brewstersches Gesetz

Für die Amplitude der reflektierten Welle mit senkrecht zur Einfallsebene schwingendem elektrischem Vektor folgt nach (7) und (2.1.1./18) für $\alpha = \alpha_{pol}$

$$R_p = \frac{1 - n_{12}^2}{1 + n_{12}^2}.$$

Wir setzen $n_{12} = 0{,}839$ ein und erhalten

$$R_p = 0{,}174, \qquad r_p = R_p{}^2 = 0{,}030.$$

Um die Polarisation des Lichtes innerhalb des Streubereiches abzuschätzen, schreiben wir

$$R_s(\alpha_{pol} + \Delta\alpha) = R_s(\alpha_{pol}) + \left(\frac{dR_s}{d\alpha}\right)_{\alpha=\alpha_{pol}} \Delta\alpha \tag{10}$$

mit $R_s(\alpha_{pol}) = 0$. Nach (2.1.2./8) folgt

$$\frac{dR_s}{d\alpha} = \frac{2n_{12}^2(1 - n_{12}^2)\sin\alpha}{\sqrt{n_{12}^2 - \sin^2\alpha}\left(n_{12}^2\cos\alpha + \sqrt{n_{12}^2 - \sin^2\alpha}\right)^2}. \tag{11}$$

Für $\alpha = \alpha_{pol}$ erhält man nach (4)

$$\left(\frac{dR_s}{d\alpha}\right)_{\alpha_{pol}} = \frac{1 - n_{12}^4}{2n_{12}^3}. \tag{12}$$

Der Winkeldifferenz 0,1° entspricht die Bogendifferenz $1{,}7 \cdot 10^{-3}$. Somit folgt, wenn $n_{12} = 0{,}839$ eingesetzt wird,

$$R_s(\alpha_{pol} + 1{,}7 \cdot 10^{-3}) = \frac{1 - 0{,}839^4}{2 \cdot 0{,}839^3} \cdot 1{,}7 \cdot 10^{-3} = 7{,}3 \cdot 10^{-4},$$

$$r_s = 5{,}3 \cdot 10^{-7}, \qquad \frac{r_s}{r_p} = \frac{5{,}3 \cdot 10^{-7}}{0{,}030} = 1{,}8 \cdot 10^{-5}.$$

Nachteilig bei dieser Erzeugung polarisierten Lichtes ist, daß nur ein geringer Teil des einfallenden natürlichen Lichtes genutzt wird.

## 2.1.5. Totalreflexion

Eine linear polarisierte Lichtwelle der Frequenz $f = 5 \cdot 10^{14}$ Hz fällt, aus Glas mit der Brechzahl $n_1 = 1{,}51$ kommend, unter dem Einfallswinkel $\alpha = 60°$ auf die Trennebene gegen Vakuum. Der elektrische Vektor schwingt unter dem Winkel 45° gegen die Einfallsebene.
Untersuchen Sie die reflektierte und die gebrochene Welle. Bestimmen Sie die Phasenverschiebung bei den beiden orthogonal zueinander schwingenden Komponenten des reflektierten Feldes. Wie stark ist die gebrochene elektromagnetische Schwingung im Abstand $\lambda$ hinter der Trennebene abgeklungen?

**Lösung:**

Der Übergang vom dichteren zum dünneren Medium ist nach (2.1.1./13) durch

$$n_{12} = \sqrt{\frac{\varepsilon_2\mu_2}{\varepsilon_1\mu_1}} < 1 \tag{1}$$

gekennzeichnet. Nach dem Brechungsgesetz (2.1.1./12) ist dabei der Ausfallswinkel $\alpha_\text{d}$ größer als der Einfallswinkel $\alpha$. Im Grenzfall

$$\sin\alpha = n_{12} \tag{2}$$

erfolgt der Ausfall streifend, d. h., $\alpha_\text{d}$ ist gleich 90°. Aus den FRESNELschen Formeln (2.1.1./18) und (2.1.2./8) entnimmt man für diesen Fall

$$R_\text{p} = 1, \qquad R_\text{s} = 1. \tag{3}$$

Die Intensität der reflektierten Welle stimmt mit der der einfallenden Welle überein. Der Einfallswinkel

$$\alpha = \alpha_\text{g} = \arcsin n_{12} \tag{4}$$

heißt **Grenzwinkel der Totalreflexion.**
Nach Überschreiten des Grenzwinkels der Totalreflexion, d. h. für $\sin\alpha > n_{12}$, folgt aus dem Brechungsgesetz (2.1.1./12)

$$\sin\alpha_\text{d} = \frac{\sin\alpha}{n_{12}} > 1: \tag{5}$$

Es gibt keinen reellen Brechungswinkel $\alpha_\text{d}$ mehr, der das Brechungsgesetz erfüllt.
In den FRESNELschen Formeln (2.1.1./18) und (2.1.2./8) für $R_\text{s}$ und $R_\text{p}$ wird der Radikand $n_{12}^2 - \sin^2\alpha$ negativ. $R_\text{s}$ und $R_\text{p}$ werden damit komplexe Größen. Sie lassen sich in der Form

$$R = \frac{a - ib}{a + ib} = e^{i\delta} \tag{6}$$

darstellen. Physikalisch bedeutet (6): Nach Überschreiten des Grenzwinkels der Totalreflexion tritt bei der reflektierten Welle eine Phasenverschiebung auf. Dem Betrag nach sind die relativen Amplituden eins:

$$|R_\text{s}| = 1, \qquad |R_\text{p}| = 1; \tag{7}$$

reflektierte und einfallende Welle besitzen die gleiche Intensität.
Für die Phasenverschiebungen erhält man in der Schreibweise der Gleichung (6)

$$\tan\frac{\delta}{2} = \frac{b}{a},$$

woraus mittels (2.1.1./18) und (2.1.2./8)

$$\delta_{rp} = 2 \arctan \frac{\sqrt{\sin^2 \alpha - n_{12}^2}}{\cos \alpha}, \tag{8}$$

$$\delta_{rs} = 2 \arctan \frac{\sqrt{\sin^2 \alpha - n_{12}^2}}{n_{12}^2 \cos \alpha} \tag{9}$$

folgt.
Die Amplituden der gebrochenen Welle sind nach (2.1.1./19) und (2.1.2./9) ebenfalls komplex. Sie sind von null verschieden. Eine gebrochene Welle ist somit auch bei Totalreflexion vorhanden, selbst wenn sich die gesamte Intensität der einfallenden Welle in der reflektierten Welle wiederfindet.
Zur Erklärung betrachten wir die Energieflußdichte durch die Trennebene bei Totalreflexion. Nach (2.1.1./6) und (2.1.2./3) tritt in der gebrochenen Welle der Faktor

$$D\, e^{ik_2(x \cos \alpha_d + y \sin \alpha_d)} \tag{10}$$

auf. Hierin wird

$$\cos \alpha_d = \sqrt{1 - \sin^2 \alpha_d} = i \frac{\sqrt{\sin^2 \alpha - n_{12}^2}}{n_{12}} \tag{11}$$

wegen (5) imaginär. Wir schreiben daher (10) in der Form

$$D\, e^{-\frac{k_2 \sqrt{\sin^2 \alpha - n_{12}^2}}{n_{12}} x}\, e^{ik_2 \sin \alpha_d y} \tag{12}$$

bzw. nach (2.1.1./12)

$$D\, e^{-\frac{\omega}{c} n_1 \sqrt{\sin^2 \alpha - n_{12}^2}\, x}\, e^{ik_2 \sin \alpha_d y}. \tag{13}$$

$\cos \alpha_d$ kann sowohl positive als auch negative imaginäre Werte annehmen. In dem nach Bild 2.1.2. gewählten Koordinatensystem ist $x$ für die gebrochene Welle positiv und wächst mit zunehmender Eindringtiefe dieser Welle. Die Wahl des negativen Vorzeichens bei $\sqrt{\sin^2 \alpha - n_{12}^2}$ würde eine gebrochene Welle ergeben, deren Intensität mit zunehmender Eindringtiefe immer größer wird und über alle Grenzen ansteigt. Damit wird der Energiesatz verletzt. Es bleibt nur das positive Vorzeichen, das auf eine gebrochene Welle führt, die mit zunehmender Eindringtiefe abklingt.
Da das Brechungsgesetz mit einem reellen Brechungswinkel $\alpha_d$ nicht erfüllt werden kann und nach (11) für $\alpha < \alpha_g$ $\cos \alpha_d$ rein imaginär ist, schreiben wir

$$\alpha_d = \frac{\pi}{2} + i\, \Delta\alpha_d. \tag{14}$$

Wegen $\cos i\, \Delta\alpha_d = \text{ch}\, \Delta\alpha_d$ und $\sin i\, \Delta\alpha_d = i\, \text{sh}\, \Delta\alpha_d$ ($\text{sh}\, \alpha_d$ und $\text{ch}\, \alpha_d$ Hyperbelfunktionen) folgt auf Grund der Additionstheoreme

$$\sin \alpha_d = \text{ch}\, \Delta\alpha_d, \tag{15}$$

$$\cos \alpha_d = -i\, \text{sh}\, \Delta\alpha_d. \tag{16}$$

Die Größe $\Delta\alpha_d$ kann mit Hilfe des Brechungsgesetzes aus (15) berechnet werden:

$$\Delta\alpha_d = \text{arcosh} \frac{\sin \alpha}{n_{12}}. \tag{17}$$

Für die Komponenten des elektromagnetischen Feldes folgt bei paralleler Polarisation aus (2.1.1./6)

$$\left.\begin{aligned} E_z{}^{\mathrm{d}} &= D_{\mathrm{p}} E_0 \exp\left(-k_2 x \operatorname{sh} \Delta\alpha_{\mathrm{d}}\right) \exp \mathrm{i}(\omega t - k_2 y \operatorname{ch} \Delta\alpha_{\mathrm{d}}), \\ H_x{}^{\mathrm{d}} &= D_{\mathrm{p}} \sqrt{\frac{\varepsilon_2}{\mu_2}}\, E_0 \exp\left(-k_2 x \operatorname{sh} \Delta\alpha_{\mathrm{d}}\right) \operatorname{ch} \Delta\alpha_{\mathrm{d}} \exp \mathrm{i}(\omega t - k_2 y \operatorname{ch} \Delta\alpha_{\mathrm{d}}), \\ H_y{}^{\mathrm{d}} &= \mathrm{i} D_{\mathrm{p}} \sqrt{\frac{\varepsilon_2}{\mu_2}}\, E_0 \exp\left(-k_2 x \operatorname{sh} \Delta\alpha_{\mathrm{d}}\right) \operatorname{sh} \Delta\alpha_{\mathrm{d}} \exp \mathrm{i}(\omega t - k_2 y \operatorname{ch} \Delta\alpha_{\mathrm{d}}). \end{aligned}\right\} \qquad (18)$$

Hieraus ergibt sich nach (1.3./12) für die Energieflußdichte an der Trennebene $x = 0$, wenn bei der Produktbildung die Realteile verwendet werden,

$$\boldsymbol{S} = \boldsymbol{E} \times \boldsymbol{H} = \begin{vmatrix} \boldsymbol{i} & \boldsymbol{j} & \boldsymbol{k} \\ 0 & 0 & E_z \\ H_x & H_y & 0 \end{vmatrix}$$

$$= D_{\mathrm{p}}{}^2 E_0{}^2 \sqrt{\frac{\varepsilon_2}{\mu_2}} \begin{pmatrix} -\cos(\omega t - k_2 y \operatorname{ch} \Delta\alpha_{\mathrm{d}}) \sin(\omega t - k_2 y \operatorname{sh} \Delta\alpha)_{\mathrm{d}} \\ \cos^2(\omega t - k_2 y \operatorname{ch} \Delta\alpha_{\mathrm{d}}) \\ 0 \end{pmatrix}. \qquad (19)$$

Der zeitliche Mittelwert über die $x$-Komponente der Energieflußdichte verschwindet; über das Quadrat der Cosinusfunktionen erhält man im Mittel 1/2. Somit folgt

$$\bar{\boldsymbol{S}} = \frac{1}{2} D_{\mathrm{p}}{}^2 E_0{}^2 \sqrt{\frac{\varepsilon_2}{\mu_2}} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} \operatorname{ch} \Delta\alpha_{\mathrm{d}}. \qquad (20)$$

Bei Totalreflexion fließt im zeitlichen Mittel keine Energie über die Trennebene in das brechende Medium. Das gleiche Ergebnis folgt mit den Komponenten nach (2.1.2./3) für orthogonale Polarisation.

In den Medien *1* und *2* treten keine Verluste durch Absorption auf. Das Verhalten der gebrochenen Welle ist daher im Zusammenhang mit den beiden Gleichungen (7) wie folgt zu deuten: Bei Totalreflexion, nach Überschreiten des Grenzwinkels, wird die einfallende Welle vollständig reflektiert. Die Intensitäten der totalreflektierten und der einfallenden Welle sind gleich.

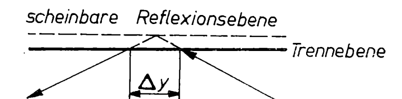



Bild 2.1.8. Totalreflexion und Versetzung $\Delta y$ der totalreflektierten Welle (GOOS-HÄNCHEN-Effekt)

Die Reflexion vollzieht sich in der Weise, daß die einfallende Welle zunächst in das brechende Medium eindringt und hier umgelenkt wird (vgl. Bild 2.1.8). Sie klingt daher mit zunehmender Eindringtiefe ab.

*Anmerkung:* Das Eindringen der elektromagnetischen Schwingung in das brechende Medium ist mit einer Versetzung $\Delta y$ der totalreflektierten gegen die einfallende Welle verbunden. Diese Strahlversetzung ist experimentell bestätigt worden (vgl. A 2.1.16.). Im vorliegenden Fall ist nach (4) der Grenzwinkel der Totalreflexion gleich

$$\alpha_{\mathrm{g}} = \arcsin \frac{1}{1{,}51} = 41{,}47°.$$

Für die Phasenverschiebungen erhalten wir mit $\cos\alpha = 0{,}500$, $\sin\alpha = 0{,}866$ nach (8) und (9)

$$\delta_{\mathrm{rp}} = 2\arctan\frac{\sqrt{0{,}866^2 - 0{,}662^2}}{0{,}5} = 1{,}68\ \mathrm{rad} = 96{,}3^\circ,$$

$$\delta_{\mathrm{rs}} = 2\arctan\frac{\sqrt{0{,}866^2 - 0{,}662^2}}{0{,}662^2\cdot 0{,}5} = 2{,}39\ \mathrm{rad} = 137{,}1^\circ.$$

Zwischen den beiden Komponenten des reflektierten Lichtes besteht die Phasenverschiebung $\delta_{\mathrm{rs}} - \delta_{\mathrm{rp}} = 0{,}71\ \mathrm{rad} = 40{,}8^\circ$. Das linear polarisiert einfallende Licht wird bei Totalreflexion in elliptisch polarisiertes umgewandelt.
Die Amplitude der gebrochenen Welle im Abstand $\lambda$ hinter der Trennebene ist nach (13) durch

$$D\,\mathrm{e}^{-\frac{\omega n_1}{c}\sqrt{\sin^2\alpha - n_{12}^2}\,\lambda} = D\,\mathrm{e}^{-2\pi n_1\sqrt{\sin^2\alpha - n_{12}^2}} = D\,\mathrm{e}^{-2\pi\cdot 1{,}51\sqrt{0{,}866^2-0{,}662^2}} = 0{,}0052\,D$$

gegeben. Das Abklingen der in das brechende Medium eindringenden Schwingung erfolgt hiernach so stark, daß bereits nach wenigen Wellenlängen Eindringtiefe kein elektromagnetisches Feld mehr nachzuweisen ist.



## Aufgaben

A 2.1.1. Bei der Reflexion eines unter dem Winkel $\alpha = 45^\circ$ einfallenden Lichtstrahles mit senkrecht zur Einfallsebene schwingendem elektrischem Vektor sollen mindestens 50% der einfallenden Strahlung reflektiert werden. Welche Grenze ergibt sich aus dieser Forderung für die Brechzahl $n_{12}$, wenn vorausgesetzt wird, daß das Licht vom optisch dünneren zum optisch dichteren Medium übergeht?

A 2.1.2. Geben Sie den Bereich der Einfallswinkel an, unter denen Licht mit senkrecht zur Einfallsebene schwingendem elektrischem Vektor bei der Reflexion an Wasser zu mindestens 50% reflektiert wird ($n_{12} = 1{,}33$).

A 2.1.3. Stellen Sie die Formeln für die relativen Amplituden bei senkrechtem Einfall für parallel und für orthogonal polarisiertes Licht auf ($\mu_1 = \mu_2$).

A 2.1.4. Drücken Sie die relativen Amplituden der reflektierten und der gebrochenen Welle allein durch den Einfallswinkel $\alpha$ und den Brechungswinkel $\alpha_{\mathrm{d}}$ aus ($\mu_1 = \mu_2$).

A 2.1.5. Stellen Sie eine Näherungsformel für $R_{\mathrm{p}}$ und $R_{\mathrm{s}}$ im Falle kleiner Einfallswinkel $\alpha$ auf.

A 2.1.6. Die Intensität des reflektierten Lichtes betrage bei orthogonaler Polarisation 10%, bei paralleler Polarisation 25% der einfallenden Intensität. Wie groß ist die Intensität der reflektierten Strahlung, wenn der elektrische Vektor unter dem Winkel 60° gegen die Einfallsebene geneigt ist?

A 2.1.7. Orthogonal polarisiertes Licht werde zu 25% reflektiert. Die Brechzahl sei $n_{12} = 2{,}0$. Geben Sie den Einfallswinkel und die relative Amplitude der gebrochenen Welle an ($\mu_1 = \mu_2$).

A 2.1.8. Natürliches Licht fällt unter dem Polarisationswinkel auf eine Glasplatte mit der Brechzahl $n = 1{,}7$. Berechnen Sie das Verhältnis der Intensität des reflektierten zu der des einfallenden Lichtes.

A 2.1.9. Zur **Herstellung polarisierten Lichtes** läßt man natürliches Licht unter dem Polarisationswinkel auf einen Satz von $m$ parallelen Glasplatten fallen und benutzt das durchgehende Licht. Die Brechzahl des Glases sei $n = 1{,}65$. Berechnen Sie die Intensität der Komponente mit parallel zur Einfallsebene schwingendem elektrischem Vektor im Verhältnis zur Intensität der orthogonal schwingenden

Komponente. Welcher relative Anteil des einfallenden Lichtes wird bei diesem Verfahren ausgenutzt? Die Zahl der Glasplatten sei $m = 10$.

A 2.1.10. Bestimmen Sie das Maximum der Phasenverschiebung zwischen der Komponente mit parallel und der mit orthogonal zur Einfallsebene schwingendem elektrischem Vektor für die reflektierte Welle im Falle $n_{12} = 0{,}65$. Das einfallende Licht sei unter 45° gegen die Einfallsebene linear polarisiert.

A 2.1.11. Stellen Sie die Formel für die Phasenverschiebung zwischen der Komponente mit parallel und der mit orthogonal zur Einfallsebene schwingendem elektrischem Vektor auf.

A 2.1.12. Welche Brechzahl muß ein Stoff mindestens haben, wenn mit einmaliger Totalreflexion gegen Vakuum zirkulares Licht erzeugt werden soll?

A 2.1.13. Unter welchem Winkel muß für $n = 1{,}5$ Licht auf die Trennfläche gegen Vakuum fallen, wenn durch zwei Totalreflexionen zirkulares Licht erzeugt werden soll?

A 2.1.14. **Minimumstrahl-Kennzeichnung.** Zur Strahldefinition für die unendlich ausgedehnte ebene Welle werden nach WOLTER zwei gegeneinander um $\pi$ phasenverschobene Wellen überlagert, von denen die erste unter dem Winkel $\alpha$, die zweite unter $\alpha + \Delta\alpha$ einfällt. Als Strahl wird die Knotenlinie definiert. Leiten Sie auf Grund dieser Strahldefinition den Strahl der ebenen Welle

$$\psi = e^{i\omega t}\, e^{-ik(x\cos\alpha + y\sin\alpha)}$$

ab.

A 2.1.15. Leiten Sie durch Minimumstrahl-Kennzeichnung die Gleichung für den reflektierten Strahl der unter dem Winkel $\alpha$ einfallenden ebenen Welle ab, wenn an der Trennebene zwischen einfallender und reflektierter Welle die Phasenverschiebung $\delta$ auftritt.

A 2.1.16. **Goos-Hänchen-Effekt** (Strahlversetzung der totalreflektierten Welle). Stellen Sie die Formeln für die Strahlversetzung bei Totalreflexion auf, wenn a) parallele, b) orthogonale Polarisation vorliegt.

A 2.1.17. Berechnen Sie den Lichtdruck auf eine Wand für einen unter dem Winkel $\alpha$ einfallenden Strahl, wenn der Anteil $r$ reflektiert wird und die Energiedichte des elektrischen Feldes $w$ ist.

A 2.1.18. Berechnen Sie zur vorangegangenen Aufgabe die Tangentialkomponente.

A 2.1.19. Berechnen Sie den Lichtdruck für einen Strahl der Energiedichte 1 W cm$^{-2}$ auf eine totalreflektierende Wand bei 60° Einfallswinkel.

A 2.1.20. Ein Strahl fällt von Luft auf eine planparallele Glasplatte und wird gebrochen. Die relative Amplitude bei der Reflexion von Luft an Glas sei $R$. Welche relative Amplitude tritt bei der Reflexion dieses Strahles von Glas an Luft auf?

## 2.2. Absorbierende Medien



### Einführung

*Phasenverschiebung der reflektierten und der gebrochenen Welle*

Reflexion und Brechung zwischen absorbierenden Medien ergeben sich durch

$$n \to n' = n(1 - i\varkappa) \tag{1}$$

nach (1.4./7). Komplexe Werte für $n'$ in den Formeln (2.1.1./16) und (2.1.2./8) für $R_p$ und $R_s$ bedeuten, daß diese Größen allgemein für alle Einfallswinkel komplex sind: Die Reflexion zwischen absorbierenden Medien führt zu einer Phasenverschie-

bung der reflektierten gegen die einfallende Welle. In gleicher Weise erhält man nach (2.1.1./19) und (2.1.2./9) eine Phasenverschiebung zwischen dem gebrochenen und dem einfallenden Strahl.

*Homogene und inhomogene Wellen*

Infolge der Absorption klingt die Amplitude einer Welle mit wachsender Eindringtiefe ab. Nach (1.4./12) und (1.2./24) folgt

$$\psi = e^{i(\omega t - \boldsymbol{k}' \cdot \boldsymbol{r})} = e^{-n\varkappa \boldsymbol{k}_0 \cdot \boldsymbol{r}} \, e^{i(\omega t - n\boldsymbol{k}_0 \cdot \boldsymbol{r})}. \tag{2}$$

Ebenso wie für die Phase kann man für die Amplitude die Punkte übereinstimmender Werte zu Gesamtheiten zusammenfassen. Wellen, deren Flächen gleicher Phase mit den Flächen gleicher Amplitude übereinstimmen, heißen homogene Wellen.

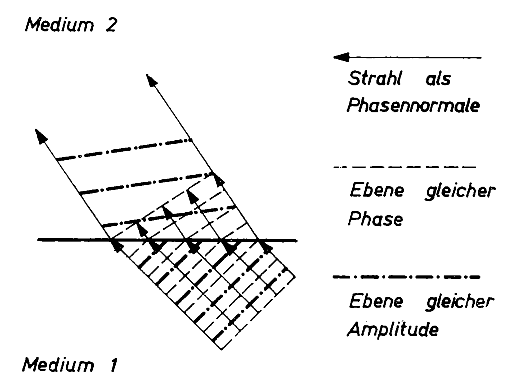



Bild 2.2.1. Die einfallende homogene Welle im Medium *1* erzeugt bei ihrer Brechung an der Trennebene zwischen absorbierenden Medien eine inhomogene Welle im Medium *2*.

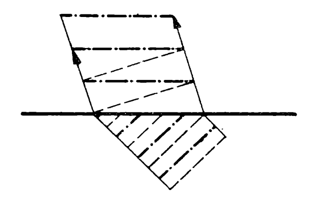



Bild 2.2.2. Inhomogene Welle im absorbierenden Medium bei der Brechung einer aus nichtabsorbierendem Medium einfallenden Welle

In inhomogenen Wellen sind die Flächen gleicher Phase von den Flächen gleicher Amplitude verschieden (vgl. Bild 2.2.1). Beispiel für das Entstehen inhomogener Wellen ist der Übergang des Lichtes von Vakuum in ein absorbierendes Medium. Die Amplitude der gebrochenen Welle klingt senkrecht zur Trennfläche ab, während die Ausbreitungsrichtung der Phase je nach dem Einfallswinkel und der Brechzahl in einem breiten Winkelbereich liegen kann (vgl. Bild 2.2.2).



## Probleme

### 2.2.1. Schwachabsorbierende Medien

In schwarzem Spezialglas wird eine Reichweite der Strahlung sichtbaren Lichtes ($\lambda = 546$ nm) von $L = 62{,}5$ µm beobachtet, d. h., eine Platte dieser Dicke dämpft die Lichtintensität auf den e-ten Teil. Der Realteil der Brechzahl ist $n = 1{,}62$.
Bestimmen Sie die Intensität der reflektierten Strahlung, wenn das einfallende Licht unter dem Winkel 30° auf die Glasplatte fällt und der elektrische Vektor senkrecht zur Einfallsebene schwingt. Die Intensität der einfallenden Strahlung betrage 10 W m$^{-2}$.

**Lösung:**

In die FRESNELschen Formeln wird anstelle von $n$ die komplexe Brechzahl

$$n' = n(1 - \mathrm{i}\varkappa) = \frac{\lambda_0}{2\pi} k' = \frac{\lambda_0}{2\pi}(k + \mathrm{i}k'') \tag{1}$$

eingeführt. Zwischen der Absorptionskonstanten $k''$ und der Reichweite $L$ besteht nach (1.4.1./8) die Beziehung

$$k'' = \frac{1}{2L}. \tag{2}$$

Somit kann $n'$ aus den vorliegenden Angaben vollständig bestimmt werden. Wird $n'$ anstelle von $n_{12}$ in die Formeln (2.1.1./18) und (2.1.2./8) für die Amplituden der reflektierten Welle eingesetzt, so erhalten wir für $\mu_1 = \mu_2$

$$R_\mathrm{p} = |R_\mathrm{p}|\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}\delta_{\mathrm{rp}}} = \frac{\cos\alpha - \sqrt{n'^2 - \sin^2\alpha}}{\cos\alpha + \sqrt{n'^2 - \sin^2\alpha}}, \tag{3}$$

$$R_\mathrm{s} = |R_\mathrm{s}|\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}\delta_{\mathrm{rs}}} = \frac{n'^2\cos\alpha - \sqrt{n'^2 - \sin^2\alpha}}{n'^2\cos\alpha + \sqrt{n'^2 - \sin^2\alpha}}. \tag{4}$$

Auf der rechten Seite in (3) und (4) ist nur $n'$ komplex. Der Einfallswinkel $\alpha$ ist reell. Im vorliegenden Fall folgt nach (2)

$$k'' = \frac{1}{2L} = \frac{1}{2\cdot 62{,}5\cdot 10^{-6}}\,\mathrm{m}^{-1} = 8\cdot 10^3\,\mathrm{m}^{-1},$$

nach (1)

$$\varkappa = \frac{k''\lambda_0}{2\pi n} = \frac{8\cdot 10^3\cdot 546\cdot 10^{-9}}{2\cdot 3{,}14\cdot 1{,}62} = 4{,}29\cdot 10^{-4}.$$

Somit ist

$$n' = 1{,}62(1 - \mathrm{i}\,4{,}29\cdot 10^{-4}),$$

$$\sqrt{n'^2 - \sin^2\alpha} = 1{,}541\cdot(1 - \mathrm{i}\,7{,}03\cdot 10^{-4}),$$

$$R_\mathrm{p} = \frac{0{,}866 - 1{,}541(1 - \mathrm{i}\,7{,}03\cdot 10^{-4})}{0{,}866 + 1{,}541(1 - \mathrm{i}\,7{,}03\cdot 10^{-4})} = -0{,}280(1 - \mathrm{i}\,1{,}5\cdot 10^{-3}).$$

Gegenüber der bei nichtabsorbierenden Medien auftretenden Phasenverschiebung $\pi$ ergibt sich eine Abweichung um $1{,}5 \cdot 10^{-3}$. Es ist also

$$\delta_{\mathrm{rp}} = \pi - 1{,}5 \cdot 10^{-3}.$$

Für die Intensität der reflektierten Strahlung erhält man

$$S_{\mathrm{r}} = S_{\mathrm{e}}\, |R_{\mathrm{p}}|^2 = 10 \cdot 0{,}280^2\, |1 - \mathrm{i}\, 1{,}5 \cdot 10^{-3}|^2 \;\mathrm{W\,m^{-2}} = 0{,}78 \;\mathrm{W\,m^{-2}}.$$

### 2.2.2. Metallreflexion

Zur Messung der optischen Konstanten von Stahl bei der Wellenlänge $\lambda = 0{,}556\,\mu\mathrm{m}$ werden die Absorption im durchgehenden Licht und das Reflexionsvermögen bei senkrechtem Einfall gemessen. Aus der Absorption der durchgehenden Strahlung wird auf die Reichweite $L = 5{,}25$ nm geschlossen. Für die Intensität der reflektierten Strahlung bei senkrechtem Einfall erhält man $r = 0{,}82$. Berechnen Sie daraus die Brechzahl $n$ und den Absorptionsindex $\varkappa$. Wie groß ist das Reflexionsvermögen für linear polarisiertes Licht mit parallel zur Einfallsebene schwingendem elektrischem Vektor, wenn der Einfallswinkel $\alpha = 45°$ beträgt? Für die Untersuchungen kann $\mu_1 = \mu_2$ vorausgesetzt werden.

**Lösung:**

Die Brechzahl für den Übergang von Vakuum zu Metall ist

$$n' = \frac{n_2'}{n_1'} = \frac{n(1 - \mathrm{i}\varkappa)}{1}. \tag{1}$$

Nach (2.2.1./2) folgt für den Absorptionskoeffizienten

$$n\varkappa = k'' \frac{\lambda_0}{2\pi} = \frac{1}{2\pi} \frac{\lambda_0}{2L}. \tag{2}$$

Das Reflexionsvermögen ist bei senkrechtem Einfall nach (2.1.1./18) und (2.1.2./8) unabhängig von der Polarisation gleich

$$r = |R|^2 = \left| \pm \frac{1 - n(1 - \mathrm{i}\varkappa)}{1 + n(1 - \mathrm{i}\varkappa)} \right|^2. \tag{3}$$

Erweitert man den Bruch in (3) mit dem konjugiert komplexen Wert, folgt die

$$\textbf{Beersche Formel} \quad r = \frac{1 - n(1 + \mathrm{i}\varkappa)}{1 + n(1 - \mathrm{i}\varkappa)} \, \frac{1 - n(1 - \mathrm{i}\varkappa)}{1 + n(1 + \mathrm{i}\varkappa)} = \frac{(1 - n)^2 + n^2\varkappa^2}{(1 + n)^2 + n^2\varkappa^2}. \tag{4}$$

Hierin ist $n\varkappa$ durch (2) bekannt, so daß in (4) nur noch $n$ als Unbekannte auftritt. Durch Auflösen ergibt sich

$$n = \frac{1 + r}{1 - r} \pm \sqrt{\frac{(1 + r)^2}{(1 - r)^2} - \left(1 + \frac{\lambda_0^2}{4\pi^2 L^2}\right)}. \tag{5}$$

Mit den vorgegebenen Werten folgt aus (2)

$$\frac{1}{4\pi L} \lambda_0 = n\varkappa = \frac{0{,}556 \cdot 10^{-6}}{4\pi \cdot 5{,}25 \cdot 10^{-9}} = 8{,}43,$$

aus (5)

$$n = \frac{1 + 0{,}82}{1 - 0{,}82} + \sqrt{\frac{1{,}82^2}{0{,}18^2} - (1 + 8{,}43^2)} = 15{,}6,$$

ferner

$$\varkappa = \frac{8{,}43}{15{,}6} = 0{,}540.$$

Die Wahl des negativen Vorzeichens hätte $\varkappa > 1$ ergeben. Für das Reflexionsvermögen der unter 45° einfallenden Welle folgt nach (2.1.2./8)

$$r_s = \left| \frac{n^2(1 + i\varkappa)^2 \cos\alpha - \sqrt{n^2(1 + i\varkappa)^2 - \sin^2\alpha}}{n^2(1 + i\varkappa)^2 \cos\alpha + \sqrt{n^2(1 + i\varkappa)^2 - \sin^2\alpha}} \right|^2, \qquad (6)$$

mit den vorgegebenen Zahlen und $\cos\alpha = \cos 45° = 0{,}707$

$$r_s = 0{,}75.$$

## 2.2.3. Versuch von O. Wiener zur fotochemischen Wirkung des Lichtes

Untersucht wird die Schwärzung der Fotoplatte als Folge der Abscheidung von Silber aus Silberbromid bei Einwirken von Licht. Es soll entschieden werden, ob die Schwärzung auf das Einwirken des elektrischen oder des magnetischen Feldes zurückzuführen ist. Zu diesem Zweck wird nach O. Wiener monochromatisches Licht senkrecht auf einen polierten Metallspiegel gerichtet.

Zur eindeutigen Vermessung der Schwärzungsstellen wird nach Bild 2.2.3 die dünne Fotoschicht unter dem kleinen Winkel $\varphi$ gegen den Metallspiegel angebracht, wodurch die Abstände im Maßstab $1/\varphi$ gegenüber den senkrechten Abständen von der Platte vergrößert werden.

Für Licht der Wellenlänge $\lambda = 560$ nm werden bei einer unter $\varphi = 0{,}1°$ gegen den Metallspiegel schräg gestellten Filmschicht Schwärzungen in den Abständen

0,08 mm, 0,24 mm, 0,40 mm, 0,56 mm, ...

festgestellt. Entscheiden Sie danach, welcher der beiden Vektoren $\boldsymbol{E}$ und $\boldsymbol{H}$ als Lichtvektor anzusehen ist.

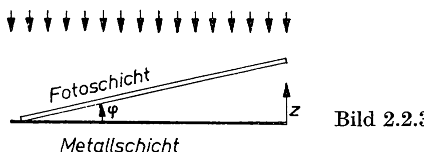



Bild 2.2.3. Versuch von O. Wiener

**Lösung:**

Bei senkrechtem Abstand werden Schwärzungsstellen beobachtet, die im Abstand $\frac{\lambda}{2}$ aufeinanderfolgen, während die erste Schwärzungsstelle vom Metallspiegel den Abstand $\frac{\lambda}{4}$ hat.

Wir legen Koordinaten nach Bild 2.2.3 zugrunde. Die Schwingungsrichtung des elektrischen Vektors wählen wir als $x$-Achse, die des magnetischen Vektors als $y$-Achse.

Für das elektrische Feld der einfallenden und der reflektierten Welle erhält man

$$E_{ex} = E_e \, e^{i(\omega t + kz)}, \qquad E_{rx} = E_r \, e^{i(\omega t - kz)}. \tag{1}$$

Das resultierende Feld ergibt sich durch Addition:

$$E = E_{ex} + E_{rx}. \tag{2}$$

An der Trennebene zwischen Vakuum und Metall müssen die Tangentialkomponenten des elektrischen Feldes im Vakuum und im Metall übereinstimmen (vgl. [4] 1.4./11). Im idealen Leiter kann sich kein elektrisches Feld ausbilden. Daher folgt

$$(E_{ex} + E_{rx})_{z=0} = 0, \tag{3a}$$

d. h.

$$E_e + E_r = 0 \qquad \text{bzw.} \qquad E_e = -E_r = E_0. \tag{3}$$

Für das elektrische Feld in Vakuum erhält man somit

$$E_x = 2\mathrm{i} E_0 \sin kz \, e^{i\omega t}. \tag{4}$$

Die Überlagerung ergibt eine stehende Welle. Bäuche treten für

$$z = m \frac{\lambda}{4} \qquad (m = 1, 3, 5, \ldots) \tag{5}$$

auf.

Das magnetische Feld der stehenden Welle läßt sich gemäß

$$\dot{\boldsymbol{B}} = \mathrm{i}\omega\mu_0 \boldsymbol{H} = -\operatorname{rot} \boldsymbol{E} = -\begin{vmatrix} \boldsymbol{i} & \boldsymbol{j} & \boldsymbol{k} \\ \frac{\partial}{\partial x} & \frac{\partial}{\partial y} & \frac{\partial}{\partial z} \\ E_x & 0 & 0 \end{vmatrix} \tag{6}$$

berechnen. Es folgt

$$H_y = -\frac{2E_0}{Z_0} \cos kx \, e^{i\omega t} = -2H_0 \cos kx \, e^{i\omega t}. \tag{7}$$

Die Bäuche des magnetischen Feldes treten hiernach für

$$z = m \frac{\lambda}{2} \qquad (m = 0, 1, 2, \ldots) \tag{8}$$

auf.

Auf dem schräg gestellten Film erhält man für das elektrische Feld Bäuche mit den folgenden Abständen vom Rand:

$$\frac{\lambda}{4} \frac{m}{\sin \varphi} \qquad (m = 1, 3, 5, \ldots) \tag{9}$$

bzw. im vorliegenden Fall wegen $\sin \varphi \approx \varphi$

$$\frac{0{,}560 \cdot 10^{-6}}{4} \frac{m \cdot 180}{\pi \cdot 0{,}1} \mathrm{m} = m \cdot 80{,}2 \,\mu\mathrm{m} \qquad (m = 1, 3, 5, \ldots).$$

Dagegen treten beim Magnetfeld Bäuche für die Randabstände

$$m \cdot 160{,}4 \,\mu\mathrm{m} \qquad (m = 0, 1, 2, \ldots)$$

auf.

Die Schwärzung der Fotoplatte wird hiernach durch den elektrischen Vektor $\boldsymbol{E}$ verursacht.

## 2.2.4. Inhomogene Welle

Aus Glas mit der Brechzahl $n_1 = 1{,}65$ und dem Absorptionsindex $\varkappa = 0{,}01$ fällt orthogonal polarisiertes Licht der Wellenlänge $\lambda = 6$ µm (infrarot) auf eine Lösung mit $n_2 = 1{,}35$, $\varkappa = 0{,}05$. Der Einfallswinkel sei $\alpha = 45°$.
Wie wird das Licht gebrochen? Bestimmen Sie die Ebenen gleicher Phase und die Ebenen gleicher Amplitude im brechenden Medium, wenn die einfallende Welle homogen ist.

**Lösung:**

Wir legen das Koordinatensystem nach Bild 2.1.2 zugrunde. Nach (2.1.2./1) gehen wir für die einfallende Welle von dem Ansatz

$$E_x^{\mathrm{e}} = -E_0 \sin\alpha \, \mathrm{e}^{\mathrm{i}f}, \qquad E_y^{\mathrm{e}} = E_0 \cos\alpha \, \mathrm{e}^{\mathrm{i}f}, \qquad H_z^{\mathrm{e}} = H_0 \, \mathrm{e}^{\mathrm{i}f} \tag{1}$$

aus. Wir setzen eine homogene einfallende Welle voraus und schreiben daher

$$f = \omega t - k_1'(x \cos\alpha + y \sin\alpha) \tag{2}$$

mit

$$k_1' = k_1 - \mathrm{i}k_1'' \tag{3}$$

gemäß (1.4./14). Ferner ist nach (1.3.1./13) und (1.4./12)

$$H = \frac{E_0}{Z_1'} = \frac{E_0 k_1'}{\mu_1 \omega}. \tag{4}$$

Die reflektierte Welle wird nach (2.1.2./2) durch

$$\left.\begin{aligned} E_x^{\mathrm{r}} &= -R_{\mathrm{s}} \, \mathrm{e}^{\mathrm{i}\delta_{\mathrm{rs}}} E_0 \sin\alpha_{\mathrm{r}} \, \mathrm{e}^{\mathrm{i}g}, \qquad E_y^{\mathrm{r}} = R_{\mathrm{s}} \, \mathrm{e}^{\mathrm{i}\delta_{\mathrm{rs}}} E_0 \cos\alpha_{\mathrm{r}} \, \mathrm{e}^{\mathrm{i}g}, \\ H_z^{\mathrm{r}} &= R_{\mathrm{s}} \, \mathrm{e}^{\mathrm{i}\delta_{\mathrm{rs}}} H_0 \, \mathrm{e}^{\mathrm{i}g} \end{aligned}\right\} \tag{5}$$

bestimmt mit

$$g = \omega t - k_1'(x \cos\alpha_{\mathrm{r}} + y \sin\alpha_{\mathrm{r}}). \tag{6}$$

Für die gebrochene Welle gehen wir von einem Ansatz aus, der dem der einfallenden Welle entspricht, gleichzeitig jedoch die Unterschiedlichkeit der Ebenen gleicher Phase und der Ebenen gleicher Amplitude berücksichtigt. Wir schreiben

$$E_x^{\mathrm{d}} = -D_{\mathrm{s}} \, \mathrm{e}^{\mathrm{i}\delta_{\mathrm{ds}}} E_0 \sin\alpha_{\mathrm{d}}' \, \mathrm{e}^{\mathrm{i}h}, \tag{7}$$

$$E_y^{\mathrm{d}} = D_{\mathrm{s}} \, \mathrm{e}^{\mathrm{i}\delta_{\mathrm{ds}}} E_0 \cos\alpha_{\mathrm{d}}' \, \mathrm{e}^{\mathrm{i}h} \tag{8}$$

mit

$$h = \omega t - [\tilde{k}_2(x \cos\alpha_{\mathrm{d}} + y \sin\alpha_{\mathrm{d}}) - \mathrm{i}\tilde{k}_2''(x \cos\alpha_{\mathrm{d}}'' + y \sin\alpha_{\mathrm{d}}'')]. \tag{9}$$

Darin sind die Ebenen gleicher Phase durch

$$x \cos\alpha_{\mathrm{d}} + y \sin\alpha_{\mathrm{d}} = C_1, \tag{10}$$

die Ebenen gleicher Amplitude durch

$$x \cos\alpha_{\mathrm{d}}'' + y \sin\alpha_{\mathrm{d}}'' = C_2 \tag{11}$$

bestimmt. $\alpha_{\mathrm{d}}$ und $\alpha_{\mathrm{d}}''$ müssen aus den Übergangsbedingungen ermittelt werden.

Setzt man

$$k_2' \cos \alpha_d' = \tilde{k}_2 \cos \alpha_d - i\tilde{k}_2'' \cos \alpha_d'', \tag{12}$$

$$k_2' \sin \alpha_d' = \tilde{k}_2 \sin \alpha_d - i\tilde{k}_2'' \sin \alpha_d'' \tag{13}$$

in den Exponenten ein, so geht dieser in

$$ih = i[\omega t - k_2'(x \cos \alpha_d' + y \sin \alpha_d')] \tag{14}$$

über. Das Magnetfeld der gebrochenen Welle kann in der Form

$$H_z^d = -\frac{E_0}{Z_2'} D_s \, e^{i\delta_{ds}} \, e^{ih} \tag{15}$$

geschrieben werden.
Die Grenzbedingungen

$$E_y^e + E_y^r = E_y^d \qquad (\text{für } x = 0), \tag{16}$$

$$H_z^e + H_z^r = H_z^d \qquad (\text{für } x = 0) \tag{17}$$

lassen sich nur erfüllen, wenn die Exponenten nach (2), (6) und (9) für $x = 0$ und alle Werte $y$ übereinstimmen. Daraus folgt nach (2) und (6) das Reflexionsgesetz

$$\sin \alpha_r = \sin \alpha \qquad \text{bzw.} \qquad \alpha_r = \pi - \alpha, \tag{18}$$

nach (2) und (9) das Brechungsgesetz

$$k_1' \sin \alpha = \tilde{k}_2 \sin \alpha - i\tilde{k}_2'' \sin \alpha_d''. \tag{19}$$

Durch Trennung von Real- und Imaginärteil entsteht, wenn man $k_1' = k_1 - ik_2''$ beachtet,

$$k_1 \sin \alpha = \tilde{k}_2 \sin \alpha_d, \tag{20}$$

$$k_1'' \sin \alpha = \tilde{k}_2'' \sin \alpha_d''. \tag{21}$$

(20) gibt die Richtung der Ebenen gleicher Phase, (21) der Ebenen gleicher Amplitude wieder. Für $k_1'' = 0$, $k_2'' \neq 0$, wenn also das Einfallsmedium nichtabsorbierend, das brechende Medium absorbierend ist, erhält man $\sin \alpha_d'' = 0$, d. h., die Ebenen gleicher Amplitude liegen parallel zur Trennebene.
Um auch die Winkel zu bestimmen, setzen wir den Lösungsansatz nach (7), (8) und (15) in die beiden MAXWELLschen Gleichungen (1.4./3) und (1.4./4) ein. Durch Auflösen nach $\tilde{k}_2$ und $\tilde{k}_2''$ folgt für $\mu_1 = \mu_2$ unter Berücksichtigung der Beziehungen (1.4./8) und (1.4./9)

$$\tilde{k}_2^2 = \frac{1}{2} k_2^2 \left(1 + \sqrt{1 + \tan^2 \delta_1} \frac{\varepsilon_1}{\varepsilon_2} \sin^2 \alpha + \sqrt{u^2 + s^2}\right), \tag{22}$$

$$\tilde{k}_2''^2 = \frac{1}{2} k_2^2 \left(-1 + \sqrt{1 + \tan^2 \delta_2} \frac{\varepsilon_1}{\varepsilon_2} \sin^2 \alpha + \sqrt{u^2 + s^2}\right) \tag{23}$$

mit den Konstanten

$$k_2^2 = \varepsilon_2 \mu_2 \omega^2 = \frac{4\pi^2}{\lambda_0^2} n_2^2 (1 - \varkappa_2^2), \tag{24}$$

$$\tan \delta_i = \frac{\gamma_i}{\varepsilon_i \omega} = \frac{2\varkappa_i}{1 - \varkappa_i^2} \qquad (i = 1, 2), \tag{25}$$

$$\frac{\varepsilon_2}{\varepsilon_1} = \frac{n_2^2 (1 - \varkappa_2^2)}{n_1^2 (1 - \varkappa_1^2)} \tag{26}$$

und den Variablen

$$u = 1 - \frac{\varepsilon_1}{\varepsilon_2} \sin^2 \alpha, \tag{27}$$

$$s = \tan \delta_2 - \tan \delta_1 \frac{\varepsilon_1}{\varepsilon_2} \sin^2 \alpha. \tag{28}$$

Wie man hieraus entnimmt, ist bei absorbierenden Medien das Verhältnis der Sinus von Einfalls- und Brechungswinkel keine Konstante, sondern vom Einfallswinkel $\alpha$ abhängig.
Mit der Kenntnis von $\tilde{k}_2$ und $\tilde{k}_2''^2$ sind nach (20) und (21) auch $\alpha_d$ und $\alpha_d''$ bekannt.
Die numerische Rechnung zur Bestimmung der Brechungswinkel $\alpha_d$, $\alpha_d''$ ergibt wegen $\varkappa_1 \ll 1$, $\varkappa_2 \ll 1$ mit hinreichender Genauigkeit

$$\sin \alpha_d = \frac{n_1}{n_2} \sin \alpha = \frac{1,65}{1,35} \cdot 0,707 = 0,864, \qquad \alpha_d = 59°10'.$$

Für $\tilde{k}_2''$ kann man angenähert schreiben

$$\tilde{k}_2''^2 = \frac{\pi^2}{\lambda_0^2} n_2^2 \left( \frac{4\varkappa_1^2 n_1^2 \sin^2 \alpha}{n_2^2} + \frac{2\left(\varkappa_2 - \varkappa_1 \frac{n_1^2}{n_2^2} \sin^2 \alpha\right)^2}{1 - \frac{n_1^2}{n_2^2} \sin^2 \alpha} \right), \tag{29}$$

mit den vorgegebenen Werten

$$\tilde{k}_2''^2 = \frac{\pi^2}{(6 \cdot 10^{-6})^2}$$

$$\times 1,35^2 \left( \frac{4 \cdot 10^{-4} \cdot 1,65^2 \cdot 0,5}{1,35^2} + \frac{2\left(0,05 - 0,01 \cdot \frac{1,65^2}{1,35^2} \cdot 0,5\right)^2}{1 - \frac{1,65^2}{1,35^2} \cdot 0,5} \right) \text{m}^{-2}$$

$$= 9,4 \cdot 10^9 \text{ m}^{-2}, \qquad \tilde{k}_2'' = 9,7 \cdot 10^4 \text{ m}^{-1}.$$

Ferner ist

$$k_1'' = \frac{2\pi n_1 \varkappa_1}{\lambda_0} = \frac{2\pi \cdot 1,65 \cdot 0,01}{6 \cdot 10^{-6}} \text{ m}^{-1} = 1,7 \cdot 10^4 \text{ m}^{-1}.$$

Damit folgt nach (21)

$$\sin \alpha_d'' = \frac{1,7 \cdot 10^4}{9,7 \cdot 10^4} \cdot 0,707 = 0,124, \qquad \alpha_d'' = 7° \, 10'.$$



## Aufgaben

A 2.2.1. Untersuchen Sie das Auftreten von Interferenzstreifen beim WIENERschen Versuch mit schräg einfallendem Licht für beide Polarisationsfälle.

A 2.2.2. Bestimmen Sie für eine homogen einfallende Welle den Grenzwinkel, bei dem entweder die Ebenen gleicher Amplitude oder die Ebenen gleicher Phase senkrecht zur Trennebene verlaufen.

A 2.2.3. Stellen Sie die Bedingungsgleichung für das Auftreten eines bezüglich der Phase streifend austretenden Strahles auf, wenn die einfallende Welle homogen ist.

A 2.2.4. Unter welcher Bedingung verlaufen die Ebenen gleicher Amplitude bei der Brechung zwischen absorbierenden Medien orthogonal zur Trennebene, wenn eine homogen einfallende Welle vorausgesetzt wird?

A 2.2.5. Wie groß ist nach der WOLTERschen Strahldefinition die Strahlversetzung am Grenzwinkel, wenn die einfallende Welle homogen ist?

A 2.2.6. Für welchen Einfallswinkel tritt das Maximum der Strahlversetzung nach der WOLTERschen Strahldefinition auf, wenn schwachabsorbierende Medien vorausgesetzt werden?

A 2.2.7. Untersuchen Sie die Amplitude der reflektierten Welle bei schwachabsorbierenden Medien für den Grenzwinkel der Totalreflexion $\alpha_g = \arcsin n_{12}$.

A 2.2.8. Berechnen Sie die Abweichung der Amplituden der reflektierten Welle vom Wert eins bei Einfall unter dem Grenzwinkel der Totalreflexion, wenn ein schwachabsorbierendes Einfallsmedium mit $\varkappa = 10^{-5}$ vorliegt und der Grenzwinkel der Totalreflexion 60° beträgt. Die Reflexion erfolge gegen Vakuum.

A 2.2.9. Berechnen Sie die Reichweite einer Lichtwelle in einer Schicht mit den optischen Konstanten $n = 4{,}8$, $\varkappa = 0{,}6$ bei senkrechtem Einfall für Licht der Wellenlänge 600 nm.

A 2.2.10. Eine Glasplatte mit der Brechzahl $n = 1{,}7$ besitze das Reflexionsvermögen $r = 0{,}88$. Wie groß ist der Absorptionsindex $\varkappa$?

A 2.2.11. Unter welchem Winkel ist eine Fotoplatte gegen einen Metallspiegel geneigt, wenn Licht der Wellenlänge 689 nm Schwingungsstellen bei 0,014 mm, 0,042 mm, 0,070 mm zeigt?

# 3. Optik anisotroper und optisch aktiver Medien

## 3.1. Grundlagen der Matrizenrechnung und der quadratischen Formen

### E Einführung

*Matrizen*

Sind die $n$ veränderlichen Größen $x_1, x_2, \ldots, x_n$ mit den $m$ veränderlichen Größen $y_1, y_2, \ldots, y_m$ durch die linearen Gleichungen

$$\left.\begin{aligned} y_1 &= a_{11}x_1 + a_{12}x_2 + \cdots + a_{1n}x_n, \\ y_2 &= a_{21}x_1 + a_{22}x_2 + \cdots + a_{2n}x_n, \\ &\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots \\ y_m &= a_{m1}x_1 + a_{m2}x_2 + \cdots + a_{mn}x_n \end{aligned}\right\} \tag{1}$$

verknüpft, so kann das System der Koeffizienten in der Form

$$\boldsymbol{A} = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2n} \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ a_{m1} & a_{m2} & \cdots & a_{mn} \end{pmatrix} \tag{2}$$

zusammengefaßt werden. $\boldsymbol{A}$ wird als **Matrix** aus $m$ Zeilen und $n$ Spalten bzw. als Matrix vom Typ $(m, n)$ bezeichnet. Ist $m = n$, so liegt eine **quadratische Matrix** vor. In diesem Falle versteht man unter $|\boldsymbol{A}|$ die aus den Elementen $a_{ik}$ gebildete Determinante. Ist $|\boldsymbol{A}|$ gleich Null, so heißt $\boldsymbol{A}$ **singulär**. Für $|\boldsymbol{A}| \neq 0$ ist $\boldsymbol{A}$ nichtsingulär. Matrizen, die nur aus einer Spalte mit $n$ Elementen bestehen, heißen $n$-dimensionale **Vektoren**

$$\boldsymbol{x} = \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_n \end{pmatrix}. \tag{3}$$

Um das **Produkt zweier Matrizen** zu definieren, betrachtet man eine zweite lineare Transformation

$$z_i = \sum_{j=1}^{m} b_{ij} y_j \qquad (i = 1, 2, \ldots, r) \tag{4}$$

mit der Koeffizientenmatrix

$$\boldsymbol{B} = \begin{pmatrix} b_{11} & b_{12} & \cdots & b_{1m} \\ b_{21} & b_{22} & \cdots & b_{2m} \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ b_{r1} & b_{r2} & \cdots & b_{rm} \end{pmatrix}. \tag{4a}$$

Die lineare Verknüpfung zwischen den Größen $z_1, z_2, \ldots, z_r$ und den Größen $x_1, x_2, \ldots, x_n$ folgt, indem die Größen $y_1, y_2, \ldots, y_m$ nach (1) in (4) eingesetzt werden. Man erhält

$$z_i = \sum_{j=1}^{m} b_{ij} y_j = \sum_{j=1}^{m} b_{ij} \sum_{k=1}^{n} a_{jk} x_k = \sum_{k=1}^{n} c_{ik} x_k \qquad (i = 1, 2, \ldots, r) \tag{5}$$

mit

$$\boxed{c_{ik} = \sum_{j=1}^{m} b_{ij} a_{jk}}\,. \tag{6}$$

Als Produkt zweier Matrizen definiert man daher die Matrix $\boldsymbol{C}$, deren Elemente $c_{ik}$ sich als Skalarprodukt der $i$-ten Zeile von $\boldsymbol{B}$ mit der $k$-ten Spalte von $\boldsymbol{A}$ ergeben.

**Beispiel 3.1.1. Produkt zweier Matrizen**

Es ist

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 1 \\ 0 & 2 & -1 \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} 2 & 1 \\ 0 & 0 \\ 1 & 3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \cdot 2 + 1 \cdot 1 & 1 \cdot 1 + 1 \cdot 3 \\ -1 \cdot 1 & -1 \cdot 3 \\ 1 \cdot 2 & 1 \cdot 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 3 & 4 \\ -1 & -3 \\ 2 & 1 \end{pmatrix}.$$

Die Multiplikation zweier Matrizen ist nicht kommutativ, d. h., es gilt im allgemeinen

$$\boldsymbol{A} \cdot \boldsymbol{B} \neq \boldsymbol{B} \cdot \boldsymbol{A}. \tag{7}$$

Zwei Matrizen, für die $\boldsymbol{AB} = \boldsymbol{BA}$ ist, heißen **miteinander vertauschbar.** Das Produkt $\boldsymbol{A} \cdot \boldsymbol{B}$ ist nur erklärt, wenn $\boldsymbol{A}$ so viele Spalten hat wie $\boldsymbol{B}$ Zeilen.

Die Gesamtheit der Variablen $x_i$ kann als $n$-dimensionaler Vektor $\boldsymbol{x}$ bzw. gemäß (3) als einspaltige Matrix dargestellt werden. In gleicher Weise werden der $m$-dimensionale Vektor $\boldsymbol{y}$ und der $r$-dimensionale Vektor $\boldsymbol{z}$ definiert:

$$\boldsymbol{y} = \begin{pmatrix} y_1 \\ \vdots \\ y_m \end{pmatrix}, \qquad \boldsymbol{z} = \begin{pmatrix} z_1 \\ \vdots \\ z_r \end{pmatrix}. \tag{8}$$

Mit diesen lassen sich die Beziehungen (1) und (4) in der Form

$$\boldsymbol{y} = \boldsymbol{A} \cdot \boldsymbol{x}, \qquad \boldsymbol{z} = \boldsymbol{B} \cdot \boldsymbol{y}$$

schreiben, woraus

$$\boldsymbol{z} = \boldsymbol{B} \cdot \boldsymbol{A} \cdot \boldsymbol{x}$$

folgt.
Werden in einer Matrix $\boldsymbol{A}$ Zeilen und Spalten miteinander vertauscht, so entsteht die **transponierte Matrix** $\boldsymbol{A}'$. Es ist $\boldsymbol{A}'' = (\boldsymbol{A}')' = \boldsymbol{A}$.

**Beispiel 3.1.2. Transponierte Matrix**

Es sei $\boldsymbol{A} = \begin{pmatrix} 1 & 2 & -1 \\ 0 & 2 & 1 \end{pmatrix}$. Dann folgt $\boldsymbol{A}' = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 2 & 2 \\ -1 & 1 \end{pmatrix}$.

Allgemein gilt

$$\boxed{(\boldsymbol{A} \cdot \boldsymbol{B})' = \boldsymbol{B}' \cdot \boldsymbol{A}'}. \tag{9}$$

Das **Skalarprodukt** zweier **$n$-dimensionaler** Vektoren

$$\boldsymbol{x} = \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_n \end{pmatrix}, \qquad \boldsymbol{y} = \begin{pmatrix} y_1 \\ \vdots \\ y_n \end{pmatrix}$$

ist

$$\boldsymbol{x}' \cdot \boldsymbol{y} = \boldsymbol{y}' \cdot \boldsymbol{x} = \sum_{i=1}^{n} x_i y_i = x_1 y_1 + \cdots + x_n y_n. \tag{10}$$

Eine Matrix, die ihrer Transponierten gleich ist,

$$\boldsymbol{A}' = \boldsymbol{A}, \tag{11}$$

heißt **symmetrische Matrix.** Für die Elemente $a_{ij}$ der symmetrischen Matrix gilt

$$a_{ij} = a_{ji}. \tag{12}$$

Eine Matrix, die nicht quadratisch ist, kann nicht symmetrisch sein.
Eine quadratische Matrix, deren Elemente $a_{ij}$ die Bedingung

$$a_{jk} = -a_{kj} \tag{13}$$

befriedigen, heißt **antimetrische Matrix.** Ihre Elemente in der Hauptdiagonalen sind Null:

$$a_{ii} = 0. \tag{14}$$

Die quadratische Matrix

$$\mathbf{1} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 1 & \dots & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & 0 & \dots & 1 \end{pmatrix} = (\delta_{ik})_n \tag{15}$$

($\delta_{ik}$ KRONECKER-Symbol; vgl. 3.1.1./2) heißt **Einheitsmatrix.** Für die quadratische Matrix $\boldsymbol{A}$ und die Einheitsmatrix $\mathbf{1}$ mit der gleichen Anzahl Zeilen gilt

$$\boldsymbol{A} \cdot \mathbf{1} = \boldsymbol{A}, \qquad \mathbf{1} \cdot \boldsymbol{A} = \boldsymbol{A}. \tag{16}$$

Allgemein läßt sich beweisen, daß zu jeder quadratischen, nichtsingulären Matrix genau eine **inverse Matrix** $\boldsymbol{A}^{-1}$ existiert mit der Eigenschaft (vgl. 3.1.1.)

$$\boldsymbol{A}^{-1} \cdot \boldsymbol{A} = \boldsymbol{A} \cdot \boldsymbol{A}^{-1} = \mathbf{1}. \tag{17}$$

Wie man sich durch Ausmultiplizieren überzeugt, bestehen für quadratische Matrizen die Beziehungen

$$\boxed{(\boldsymbol{A} \cdot \boldsymbol{B})^{-1} = \boldsymbol{B}^{-1} \cdot \boldsymbol{A}^{-1}}, \tag{18}$$

$$\boxed{(\boldsymbol{A}^{-1})' = \boldsymbol{A}'^{-1}}. \tag{19}$$

Eine Matrix

$$\boldsymbol{A} = (a_{ij})$$

wird **orthogonal** genannt, wenn sie quadratisch ist und das innere Produkt zweier verschiedener Zeilen gleich Null, jeder Zeile mit sich selbst eins ist:

$$\sum_{k=1}^{n} a_{ik} a_{jk} = \delta_{ij}. \tag{20}$$

Diese Beziehungen sind gleichbedeutend mit

$$\boldsymbol{A} \cdot \boldsymbol{A}' = \mathbf{1} \qquad \text{bzw.} \qquad \boldsymbol{A}' = \boldsymbol{A}^{-1}. \tag{21}$$

Allgemein läßt sich beweisen: Wenn $\boldsymbol{A}' = \boldsymbol{A}^{-1}$ ist, liegt eine orthogonale Matrix $\boldsymbol{A}$ vor. Die transponierte Matrix $\boldsymbol{A}'$ einer orthogonalen Matrix ist daher ebenfalls orthogonal. Für die Determinante $|\boldsymbol{A}|$ orthogonaler Matrizen gilt $|\boldsymbol{A}| = \pm 1$. Die Substitution $\boldsymbol{y} = \boldsymbol{A} \cdot \boldsymbol{x}$ mit einer orthogonalen Matrix heißt **orthogonale Transformation.**

*Charakteristische Gleichung einer quadratischen Matrix*

Es sei $\boldsymbol{B} = (b_{ij})$ eine quadratische $n$-reihige Matrix, $\boldsymbol{x}$ ein $n$-dimensionaler Vektor gemäß (3), $c$ ein Parameter. Die Matrizengleichung

$$\boldsymbol{B} \cdot \boldsymbol{x} - c\boldsymbol{x} = \mathbf{0} \tag{22}$$

oder ausgeschrieben

$$\begin{array}{llll} (b_{11}-c)\,x_1 + b_{12}x_2 & + \cdots + b_{1n}x_n & = 0, \\ b_{21}x_1 + (b_{22}-c)\,x_2 & + \cdots + b_{2n}x_n & = 0, \\ \cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots & & \\ b_{n1}x_1 + b_{n2}x_2 & + \cdots + (b_{nn}-c)\,x_n & = 0 \end{array}$$

kann als System linearer Gleichungen zur Bestimmung der unbekannten Größen $x_1, x_2, \ldots, x_n$ aufgefaßt werden. Es ist nur dann lösbar, wenn seine Koeffizientendeterminante verschwindet:

$$|(b_{ij} - \delta_{ij}c)| = \begin{vmatrix} b_{11}-c & b_{12} & & b_{1n} \\ b_{21} & b_{22}-c & & b_{2n} \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ b_{n1} & b_{n2} & \ldots & b_{nn}-c \end{vmatrix} = 0. \tag{23}$$

(23) heißt **charakteristische Gleichung** der Matrix $\boldsymbol{B}$; ihre Wurzeln $c_1, \ldots, c_n$ sind die **Eigenwerte** der Matrix $\boldsymbol{B}$. Die Lösungsvektoren $\boldsymbol{x}$ heißen **Eigenvektoren** von $\boldsymbol{B}$.

*Quadratische Formen*

Gegeben sei gemäß (3) ein Vektor $\boldsymbol{x}$ aus $n$ variablen Größen $x_1, x_2, \ldots, x_n$. $\boldsymbol{B} = (b_{ij})$ gebe eine $n$-reihige symmetrische Matrix an.
Unter einer quadratischen Form $F = F(x_1, \ldots, x_n)$ von $n$ Variablen versteht man die homogene Funktion zweiten Grades

$$F = \boldsymbol{x}' \cdot \boldsymbol{B} \cdot \boldsymbol{x} = \sum_{i,j=1}^{n} b_{ij}x_ix_j. \tag{24}$$

Für $n = 3$ und reelle Elemente $b_{ij}$ stellt $F = 1$ die Gleichung einer Fläche zweiter Ordnung dar:

$$a_{11}x_1^2 + 2a_{12}x_1x_2 + 2a_{13}x_1x_3 + a_{22}x_2^2 + 2a_{23}x_2x_3 + a_{33}x_3^2 = 1.$$

Der variable Vektor $\boldsymbol{x}$ kann mittels der linearen Substitution $\boldsymbol{y} = \boldsymbol{A}\boldsymbol{x}$ durch $\boldsymbol{y}$ ersetzt werden. Die quadratische Form geht damit wegen $\boldsymbol{x}' = \boldsymbol{y}'\boldsymbol{A}'^{-1}$ in

$$F = \boldsymbol{y}' \cdot \boldsymbol{A}'^{-1} \cdot \boldsymbol{B} \cdot \boldsymbol{A}^{-1} \cdot \boldsymbol{y} \tag{25}$$

über. Für orthogonale Matrizen mit $\boldsymbol{A} = \boldsymbol{A}'^{-1}$ folgt

$$F = \boldsymbol{y}' \cdot \boldsymbol{A} \cdot \boldsymbol{B} \cdot \boldsymbol{A}^{-1} \cdot \boldsymbol{y}. \tag{25a}$$

Allgemein läßt sich beweisen: Ist $\boldsymbol{B}$ eine $n$-reihige symmetrische Matrix, gibt es stets eine orthogonale Matrix $\boldsymbol{A}$, so daß man

$$\boldsymbol{A} \cdot \boldsymbol{B} \cdot \boldsymbol{A}^{-1} = \boldsymbol{C} = \begin{pmatrix} c_1 & 0 & \ldots & 0 \\ 0 & c_2 & \ldots & 0 \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ 0 & 0 & \ldots & c_n \end{pmatrix} \tag{26}$$

erhält. Daher läßt sich die quadratische Form (24) durch lineare Substitution auf

$$F = \sum_{i=1}^{n} c_i y_i^2 \tag{27}$$

bringen. Die zugeordnete orthogonale Transformation $\boldsymbol{y} = \boldsymbol{A} \cdot \boldsymbol{x}$ heißt **Hauptachsentransformation** (vgl. 3.1.6.).
In der Matrizenrechnung wird der folgende Satz bewiesen: Zwei quadratische Formen $\boldsymbol{x}' \cdot \boldsymbol{B}_1 \cdot \boldsymbol{x}$ und $\boldsymbol{z}' \cdot \boldsymbol{B}_2 \cdot \boldsymbol{z}$ lassen sich durch orthogonale Transformation $\boldsymbol{z} = \boldsymbol{A} \cdot \boldsymbol{x}$ genau dann ineinander überführen, so daß gilt

$$\boldsymbol{x}' \cdot \boldsymbol{B}_1 \cdot \boldsymbol{x} = \boldsymbol{z}' \cdot \boldsymbol{B}_2 \cdot \boldsymbol{z} = \boldsymbol{y}' \cdot \boldsymbol{C} \cdot \boldsymbol{y}, \tag{28}$$

wobei $\boldsymbol{C}$ eine Diagonalmatrix ist, wenn die Matrizen $\boldsymbol{B}_1$ und $\boldsymbol{B}_2$ gleiche Eigenwerte haben. Zwei quadratische Formen mit dieser Eigenschaft heißen **äquivalent.**

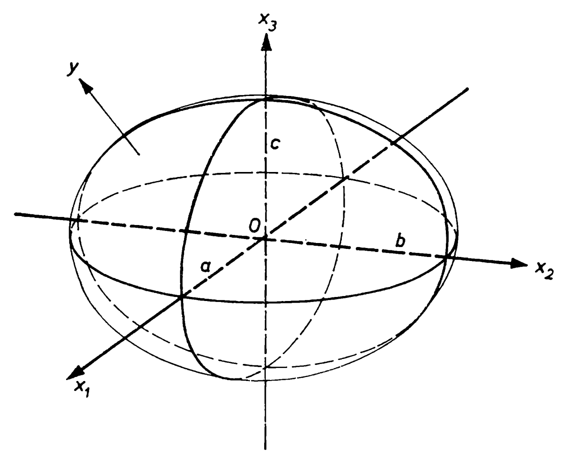



Bild 3.1.1. Ellipsoid als Niveaufläche $F = \boldsymbol{x}' \cdot \boldsymbol{B} \cdot \boldsymbol{x} = 1$ mit Flächennormale $\boldsymbol{y}$

Wenn die Größen $x_1, x_2, \ldots$ in ihrem gesamten Variabilitätsbereich endlich sind, so stellt die Verknüpfung

$$\boldsymbol{x}' \cdot \boldsymbol{B} \cdot \boldsymbol{x} = 1 \tag{28a}$$

ein Ellipsoid dar. Es wird als **Tensorellipsoid** bezeichnet (vgl. Bild 3.1.1).

*Unitäre Transformation*

Werden in einer Matrix $\boldsymbol{A}$ mit komplexen Elementen $a_{ik}$ Zeilen und Spalten vertauscht und die konjugiert komplexen Werte eingesetzt, so entsteht die **adjungierte Matrix**

$$\bar{\boldsymbol{A}} = (a_{ki}^*). \tag{29}$$

Es besteht die Beziehung

$$\overline{(\boldsymbol{A} \cdot \boldsymbol{B})} = \bar{\boldsymbol{B}} \cdot \bar{\boldsymbol{A}}. \tag{30}$$

Matrizen $\boldsymbol{A}$ mit der Eigenschaft

$$\boldsymbol{A} \cdot \bar{\boldsymbol{A}} = 1 \qquad \text{bzw.} \qquad \boxed{\bar{\boldsymbol{A}} = \boldsymbol{A}^{-1}} \tag{31}$$

heißen **unitär**.

Die Bilinearform $\bar{\boldsymbol{y}} \cdot \eta$ zweier Vektoren $\boldsymbol{y}$ und $\eta$ ist gegen unitäre Transformation, d. h. Transformation

$$\boldsymbol{y} = \boldsymbol{A} \cdot \boldsymbol{x}, \qquad \eta = \boldsymbol{A} \cdot \xi \tag{32}$$

mit unitärer Matrix $\boldsymbol{A}$ invariant:

$$\bar{\boldsymbol{y}} \cdot \eta = \bar{\boldsymbol{x}} \cdot \bar{\boldsymbol{A}} \cdot \boldsymbol{A} \cdot \xi = \bar{\boldsymbol{x}} \cdot \xi. \tag{33}$$

Orthogonale Matrizen mit reellen Elementen sind nach (21) stets unitär.

*Spur einer Matrix*

Die Summe der Elemente einer Matrix $\boxed{\boldsymbol{B} = (b_{ik})}$ in der Hauptdiagonalen

$$sp(\boldsymbol{B}) = \sum_{i=1}^{n} b_{ii} \tag{34}$$

heißt **Spur** der Matrix.

Gegenüber Koordinatentransformation $\boldsymbol{y} = \boldsymbol{A}\boldsymbol{x}$ ist die Spur invariant, d. h., es gilt (vgl. A 3.1.12.)

$$\boxed{sp(\boldsymbol{A} \cdot \boldsymbol{B} \cdot \boldsymbol{A}^{-1}) = sp(\boldsymbol{B})}\,. \tag{35}$$

# P Probleme

## 3.1.1. Inverse Matrix

Bestimmen Sie die inverse Matrix der Matrix

$$\boldsymbol{A} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}.$$

**Lösung:**

Die Matrizengleichung

$$\left.\begin{aligned} \boldsymbol{A} \cdot \boldsymbol{B} &= \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2n} \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ a_{n1} & a_{n2} & \cdots & a_{nn} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} b_{11} & b_{12} & & b_{1n} \\ b_{21} & b_{22} & & b_{2n} \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ b_{n1} & b_{n2} & \cdots & b_{nn} \end{pmatrix} \\ &= \boldsymbol{1} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & & 0 \\ 0 & 1 & & 0 \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ 0 & 0 & & 1 \end{pmatrix} \end{aligned}\right\} \tag{1}$$

ist identisch mit den $n^2$ Gleichungen

$$\sum_{j=1}^{n} a_{ij} b_{jk} = \delta_{ik} = \begin{cases} 1 & i = k \\ 0 & i \neq k \end{cases}. \tag{2}$$

Wir betrachten die $n$ Gleichungen für $k = 1$, $i = 1, \ldots, n$. Sie können als System zur Bestimmung der $n$ unbekannten Größen $b_{11}, b_{21}, \ldots, b_{n1}$ aufgefaßt werden. Nach der CRAMERschen Regel zur Lösung eines linearen Gleichungssystems folgt

$$b_{11} = \frac{D_{11}}{|\boldsymbol{A}|}, \qquad b_{21} = \frac{D_{21}}{|\boldsymbol{A}|}, \ldots, b_{n1} = \frac{D_{n1}}{|\boldsymbol{A}|}. \tag{3}$$

Darin ist

$$D_{11} = \begin{vmatrix} 1 & a_{12} & a_{1n} \\ 0 & a_{22} & a_{2n} \\ \cdots & \cdots & \cdots \\ 0 & a_{n2} & a_{nn} \end{vmatrix}, \ldots, D_{n1} = \begin{vmatrix} a_{11} & a_{12} & 1 \\ a_{21} & a_{22} & 0 \\ \cdots & \cdots & \cdots \\ a_{n1} & a_{n2} \ldots & 0 \end{vmatrix}. \tag{4}$$

Entwickelt man die erste Determinante nach der ersten Spalte, die zweite nach der zweiten usf., so folgt

$$D_{11} = A_{11}, \qquad D_{21} = A_{12}, \ldots, D_{n1} = A_{1n}. \tag{5}$$

Allgemein ergibt sich in Fortführung des Verfahrens

$$b_{ik} = \frac{A_{ki}}{|\boldsymbol{A}|}. \tag{6}$$

Darin bedeutet $A_{ki}$ die Adjunkte der Determinante $|\boldsymbol{A}| = a_{ik}$, d. h. die mit dem Faktor $(-1)^{i+k}$ multiplizierte Unterdeterminante, die nach Streichen der $k$-ten Zeile und der $i$-ten Spalte aus $|\boldsymbol{A}|$ entsteht. Für $|\boldsymbol{A}| = 0$ hat $\boldsymbol{A}$ keine Inverse.
Im vorliegenden Fall ist $|\boldsymbol{A}| = 1$, $A_{11} = A_{22} = A_{33} = 1$, $A_{31} = -1$, $A_{13} = A_{12} = A_{21} = A_{23} = A_{32} = 0$. Damit folgt

$$\boldsymbol{B} = \boldsymbol{A}^{-1} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & -1 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}.$$

## 3.1.2. Drehung, Spiegelung, Drehspiegelung, Inversion

Stellen Sie die Operatoren der Drehung $\boldsymbol{C}$ und der Spiegelung $\boldsymbol{\sigma}$ durch Matrizen dar.
Nehmen Sie speziell an, ein Körper in einem $x_1, x_2, x_3$-Koordinatensystem werde a) um den Winkel $\varphi = 180°$ verdreht, wobei die $x_3$-Achse Drehachse sei, b) an der senkrecht zur $x_3$-Achse liegenden $x_1, x_2$-Ebene gespiegelt und c) um die $x_3$-Achse um 180° gedreht und anschließend gespiegelt.

**Lösung:**

Eine Drehung des Körpers um den Winkel $-\varphi$ um die $x_3$-Achse bei festbleibendem Koordinatensystem ist gleichbedeutend mit einer Drehung $\varphi$ des Koordinatensystems um die $x_3$-Achse und damit mit der Koordinatentransformation

$$\tilde{x}_1 = x_1 \cos\varphi + x_2 \sin\varphi,$$
$$\tilde{x}_2 = -x_1 \sin\varphi + x_2 \cos\varphi,$$
$$\tilde{x}_3 = x_3.$$

In Matrizen kann man dafür

$$\tilde{\boldsymbol{x}} = \boldsymbol{C}\boldsymbol{x} \tag{1}$$

schreiben mit dem Operator $\boldsymbol{C} = \boldsymbol{C}(\varphi)$ der Drehung um die $x_3$-Achse:

$$\boldsymbol{C}(\varphi) = \begin{pmatrix} \cos\varphi & \sin\varphi & 0 \\ -\sin\varphi & \cos\varphi & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}. \tag{2}$$

Bei der Spiegelung $\boldsymbol{\sigma}$ an der $\tilde{x}_1$, $\tilde{x}_2$-Ebene, die mit der $x_1$, $x_2$-Ebene identisch ist, geht der Vektor $\tilde{\boldsymbol{x}}$ mit den Komponenten $\tilde{x}_1$, $\tilde{x}_2$, $\tilde{x}_3$ in den Vektor $\tilde{\tilde{\boldsymbol{x}}}$ mit den Komponenten $\tilde{\tilde{x}}_1$, $\tilde{\tilde{x}}_2$, $\tilde{\tilde{x}}_3$ über:

$$\tilde{\tilde{\boldsymbol{x}}} = \boldsymbol{\sigma} \cdot \tilde{\boldsymbol{x}} \tag{3}$$

mit

$$\boldsymbol{\sigma} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}. \tag{4}$$

Die Drehung $\boldsymbol{C}(\varphi)$ um die $x_3$-Achse und die nachfolgende Spiegelung $\boldsymbol{\sigma}$ an der $x_1$, $x_2$-Ebene lassen sich gemäß

$$\tilde{\tilde{\boldsymbol{x}}} = \boldsymbol{\sigma} \cdot \tilde{\boldsymbol{x}} = \boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{C} \cdot \boldsymbol{x} = \boldsymbol{S} \cdot \boldsymbol{x} \tag{5}$$

durch den Operator der **Drehspiegelung** $\boldsymbol{S}$, d. h. durch

$$\boldsymbol{S} = \boldsymbol{\sigma}\boldsymbol{C} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} \cos\varphi & \sin\varphi & 0 \\ -\sin\varphi & \cos\varphi & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos\varphi & \sin\varphi & 0 \\ -\sin\varphi & \cos\varphi & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} \tag{6}$$

darstellen. Es gilt dabei $\boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{C} = \boldsymbol{C} \cdot \boldsymbol{\sigma}$.
Für die aus der Drehung um 180° und der nachfolgenden Spiegelung an der zur Drehachse senkrechten Ebene bestehende **Inversion** $\boldsymbol{i}$ folgt

$$\boldsymbol{i} = \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}. \tag{7}$$

### 3.1.3. Operator der Drehung bei Koordinatentransformation

Um die $y_1$-Achse erfolge eine Drehung mit konstanter Winkelgeschwindigkeit $\omega$. Stellen Sie diese im $\boldsymbol{x}$-Koordinatensystem dar. Das $\boldsymbol{y}$-System ergebe sich aus dem $\boldsymbol{x}$-System durch die Drehung $\varphi = \dfrac{\pi}{4}$ um die $x_3$-Achse und Streckung der Achsen um $m_1 = 2$, $m_2 = 4$, $m_3 = 8$.

**Lösung:**

Die Verknüpfung zwischen $\boldsymbol{x}$ und $\boldsymbol{y}$ ist durch

$$\boldsymbol{y} = \boldsymbol{A} \cdot \boldsymbol{x}, \qquad \boldsymbol{y}(t) = \boldsymbol{A} \cdot \boldsymbol{x}(t) \tag{1}$$

gegeben. Die beobachtete Operation sei im $\boldsymbol{y}$-System durch

$$\boldsymbol{y}(t) = \boldsymbol{C}(t)\,\boldsymbol{y} \tag{2}$$

definiert. Damit folgt

$$\boldsymbol{x}(t) = \boldsymbol{A}^{-1} \cdot \boldsymbol{y}(t) = \boldsymbol{A}^{-1} \cdot \boldsymbol{C}(t)\, \boldsymbol{y} = \boldsymbol{A}^{-1} \cdot \boldsymbol{C}(t)\, \boldsymbol{A} \cdot \boldsymbol{x}, \tag{3}$$

d. h., der Operator $\boldsymbol{C}$ im $\boldsymbol{y}$-Raum wird im $\boldsymbol{x}$-Raum durch die Matrix $\boldsymbol{A}^{-1}\boldsymbol{C}\boldsymbol{A}$ dargestellt. Im vorliegenden Fall ist

$$\boldsymbol{A} = \begin{pmatrix} \frac{1}{m_1} & 0 & 0 \\ 0 & \frac{1}{m_2} & 0 \\ 0 & 0 & \frac{1}{m_3} \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} \cos\varphi & \sin\varphi & 0 \\ -\sin\varphi & \cos\varphi & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}. \tag{4}$$

Eine mit konstanter Winkelgeschwindigkeit $\omega$ um die $y_1$-Achse vor sich gehende Drehung ist durch

$$\boldsymbol{C} = \boldsymbol{C}(t) = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \cos\omega t & -\sin\omega t \\ 0 & \sin\omega t & \cos\omega t \end{pmatrix} \tag{5}$$

gegeben. Im $\boldsymbol{x}$-System wird diese Drehung durch den Operator

$$\boldsymbol{A}^{-1} \cdot \boldsymbol{C} \cdot \boldsymbol{A} =$$

$$\begin{pmatrix} \cos\varphi & -\sin\varphi & 0 \\ \sin\varphi & \cos\varphi & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} m_1 & 0 & 0 \\ 0 & m_2 & 0 \\ 0 & 0 & m_3 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \cos\omega t & -\sin\omega t \\ 0 & \sin\omega t & \cos\omega t \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \frac{1}{m_1} & 0 & 0 \\ 0 & \frac{1}{m_2} & 0 \\ 0 & 0 & \frac{1}{m_3} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \cos\varphi & \sin\varphi & 0 \\ -\sin\varphi & \cos\varphi & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

$$= \begin{pmatrix} \cos^2\varphi + \sin^2\varphi\, \cos\omega t & \cos\varphi\sin\varphi - \cos\varphi\sin\varphi\cos\omega t & \frac{m_2}{m_3}\sin\varphi\sin\omega t \\ \cos\varphi\sin\varphi - \cos\varphi\sin\varphi\cos\omega t & \sin^2\varphi + \cos^2\varphi\cos\omega t & -\frac{m_2}{m_3}\cos\varphi\sin\omega t \\ -\frac{m_3}{m_2}\sin\varphi\sin\omega t & \frac{m_3}{m_2}\cos\varphi\sin\omega t & \cos\omega t \end{pmatrix} \tag{6}$$

wiedergegeben.
Mit den vorgegebenen Zahlen folgt

$$\boldsymbol{A}^{-1} \cdot \boldsymbol{C} \cdot \boldsymbol{A} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 + \cos\omega t & 1 - \cos\omega t & \frac{1}{2}\sqrt{2}\sin\omega t \\ 1 - \cos\omega t & 1 + \cos\omega t & -\frac{1}{2}\sqrt{2}\sin\omega t \\ -2\sqrt{2}\sin\omega t & 2\sqrt{2}\sin\omega t & 2\cos\omega t \end{pmatrix}.$$

### 3.1.4. Orthogonalität der Lösungsvektoren bei voneinander verschiedenen Wurzeln der charakteristischen Gleichung

Es seien $c_1$ und $c_2$ zwei voneinander verschiedene Wurzeln der charakteristischen Gleichung (3.1./22) einer symmetrischen Matrix $\boldsymbol{B}$. Beweisen Sie, daß die zugeordneten Lösungsvektoren

$$\boldsymbol{x}_1 = \begin{pmatrix} x_{11} \\ \vdots \\ x_{1n} \end{pmatrix} \quad \text{und} \quad \boldsymbol{x}_2 = \begin{pmatrix} x_{21} \\ \vdots \\ x_{2n} \end{pmatrix} \tag{1}$$

zueinander orthogonal sind, d. h., daß

$$\boldsymbol{x}_1' \cdot \boldsymbol{x}_2 = 0 \quad \text{bzw.} \quad \boldsymbol{x}_2' \cdot \boldsymbol{x}_1 = 0 \tag{2}$$

gilt.

**Lösung:**

Da $\boldsymbol{x}_1$ und $\boldsymbol{x}_2$ Lösungsvektoren der charakteristischen Gleichung sind, gilt

$$\boldsymbol{B} \cdot \boldsymbol{x}_1 = c_1\boldsymbol{x}_1, \qquad \boldsymbol{B} \cdot \boldsymbol{x}_2 = c_2\boldsymbol{x}_2. \tag{3}$$

Nach Multiplikation folgt

$$\boldsymbol{x}_2' \cdot \boldsymbol{B} \cdot \boldsymbol{x}_1 = c_1\boldsymbol{x}_2' \cdot \boldsymbol{x}_1, \qquad \boldsymbol{x}_1' \cdot \boldsymbol{B} \cdot \boldsymbol{x}_2 = c_2\boldsymbol{x}_1' \cdot \boldsymbol{x}_2. \tag{4}$$

Wegen (3.1./18) und $\boldsymbol{B} = \boldsymbol{B}'$, $\boldsymbol{x}'' = \boldsymbol{x}$ ergibt sich

$$(\boldsymbol{x}_2' \cdot \boldsymbol{B} \cdot \boldsymbol{x}_1)' = (\boldsymbol{B} \cdot \boldsymbol{x}_1)' \cdot \boldsymbol{x}_2 = \boldsymbol{x}_1' \cdot \boldsymbol{B} \cdot \boldsymbol{x}_2. \tag{5}$$

Das Produkt $\boldsymbol{x}_2' \cdot \boldsymbol{B} \cdot \boldsymbol{x}_1$ stellt eine skalare Größe dar, die als Matrix aus nur einer Zeile und einer Spalte und damit nur einem Element aufgefaßt werden kann. Die transponierte Matrix ist wieder das Element selbst, so daß

$$(\boldsymbol{x}_2' \cdot \boldsymbol{B} \cdot \boldsymbol{x}_1)' = \boldsymbol{x}_2' \cdot \boldsymbol{B} \cdot \boldsymbol{x}_1 \tag{6}$$

gilt. Aus (4) erhält man daher

$$c_1\boldsymbol{x}_2' \cdot \boldsymbol{x}_1 = c_2\boldsymbol{x}_1' \cdot \boldsymbol{x}_2, \tag{7}$$

wofür man wegen $\boldsymbol{x}_1' \cdot \boldsymbol{x}_2 = \boldsymbol{x}_2' \cdot \boldsymbol{x}_1$ schreiben kann

$$(c_1 - c_2)\, \boldsymbol{x}_1' \cdot \boldsymbol{x}_2 = 0. \tag{8}$$

Da $c_1$ und $c_2$ nach Voraussetzung voneinander verschieden sind, folgt aus (8) die Orthogonalität der Lösungsvektoren für **symmetrische Matrizen:**

$$\boldsymbol{x}_1' \cdot \boldsymbol{x}_2 = 0.$$

### 3.1.5. Normale der Tensorfläche

Vorgegeben sei die lineare Vektorfunktion

$$\boldsymbol{y} = \begin{pmatrix} y_1 \\ y_2 \\ y_3 \end{pmatrix} = \boldsymbol{B} \cdot \boldsymbol{x} = \begin{pmatrix} b_{11} & b_{12} & b_{13} \\ b_{12} & b_{22} & b_{23} \\ b_{13} & b_{23} & b_{33} \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix} \tag{1}$$

mit $b_{11} = 3$, $b_{12} = b_{13} = 0$, $b_{22} = 13$, $b_{23} = 6$, $b_{33} = 8$.

Bestimmen Sie die Tensorfläche

$$F = \boldsymbol{x}' \cdot \boldsymbol{B} \cdot \boldsymbol{x} = 1. \tag{2}$$

Welche Richtung hat die Flächennormale in einem vorgegebenen Punkt $\boldsymbol{x}$ der Tensorfläche? Wie lauten die Koordinaten des Punktes, in dem die $x_1$-Achse die Tensorfläche schneidet? Welche Richtung hat dort die Flächennormale?

**Lösung:**

Durch Ausmultiplizieren von (2) ergibt sich als Gleichung der Tensorfläche

$$F = b_{11}x_1^2 + 2b_{12}x_1x_2 + 2b_{13}x_1x_3 + b_{22}x_2^2 + 2b_{23}x_2x_3 + b_{33}x_3^2 = 1. \tag{2a}$$

$F = F(x_1, x_2, x_3)$ kann als skalare Ortsfunktion gedeutet werden. Ihr Gradient

$$\frac{\mathrm{d}F}{\mathrm{d}\boldsymbol{x}} = \begin{pmatrix} \frac{\mathrm{d}F}{\mathrm{d}x_1} \\ \frac{\mathrm{d}F}{\mathrm{d}x_2} \\ \frac{\mathrm{d}F}{\mathrm{d}x_3} \end{pmatrix} \tag{3}$$

ist ein Vektor in Richtung der Flächennormalen auf der Niveaufläche $F = \text{const}$.
Nach (2) erhält man

$$\frac{\mathrm{d}F}{\mathrm{d}\boldsymbol{x}} = \begin{pmatrix} b_{11}x_1 + b_{12}x_2 + b_{13}x_3 \\ b_{12}x_1 + b_{22}x_2 + b_{23}x_3 \\ b_{13}x_1 + b_{23}x_2 + b_{33}x_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} y_1 \\ y_2 \\ y_3 \end{pmatrix} = \boldsymbol{y}. \tag{4}$$

Der Vektor $\boldsymbol{y}$ hat die Richtung der Flächennormalen auf der Tensorfläche $F = \text{const}$ (vgl. Bild 3.1.1).
Die $x_1$-Achse ist durch $x_2 = 0$, $x_3 = 0$ gekennzeichnet. Aus (2) folgt somit für die Koordinaten der Schnittpunkte des Ellipsoids mit der $x_1$-Achse: $\left(\frac{1}{\sqrt{3}}, 0, 0\right)$, $\left(-\frac{1}{\sqrt{3}}, 0, 0\right)$. Der zugeordnete $y$-Tensor ist nach (1)

$$\boldsymbol{y} = \begin{pmatrix} 3 & 0 & 0 \\ 0 & 13 & 6 \\ 0 & 6 & 8 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} \pm\frac{1}{\sqrt{3}} \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \pm\sqrt{3} \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix},$$

d. h., die Flächennormale des Ellipsoids hat in den betrachteten Punkten die Richtung der positiven bzw. negativen $x_1$-Achse.

### 3.1.6. Hauptachsentransformation

Transformieren Sie die lineare Vektorfunktion

$$\boldsymbol{y} = \begin{pmatrix} y_1 \\ y_2 \\ y_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} b_{11} & b_{12} & b_{13} \\ b_{12} & b_{22} & b_{23} \\ b_{13} & b_{23} & b_{33} \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix} = \boldsymbol{B} \cdot \boldsymbol{x} \tag{1}$$

auf die Hauptachsen und bestimmen Sie die Länge der Halbachsen für die Tensorfläche

$$\boldsymbol{x}' \cdot \boldsymbol{B} \cdot \boldsymbol{x} = 1. \tag{2}$$

Es sei $b_{11} = 3$, $b_{12} = b_{13} = 0$, $b_{22} = 13$, $b_{23} = 6$, $b_{33} = 8$.

**Lösung:**

In den Scheitelpunkten der Fläche nimmt der Abstand vom Flächenmittel- bzw. Koordinatenanfangspunkt $0$ einen Extremwert an; das gleiche gilt für das Quadrat dieses Wertes

$$f = x_1^2 + x_2^2 + x_3^2. \tag{3}$$

Dabei sind nach (2) die Variablen $x_1$, $x_2$, $x_3$ durch die Nebenbedingung

$$\begin{aligned} g &= \boldsymbol{x}' \cdot \boldsymbol{B} \cdot \boldsymbol{x} - 1 \\ &= b_{11}x_1^2 + 2b_{12}x_1x_2 + b_{22}x_2^2 + 2b_{13}^2x_1x_3 + 2b_{23}x_2x_3 + b_{33}x_3^2 - 1 = 0 \end{aligned} \tag{4}$$

miteinander verknüpft.

Entsprechend dem LAGRANGEschen Verfahren der Variationsrechnung wird die Nebenbedingung (4) mit dem LAGRANGEschen Multiplikator $\frac{1}{c}$ versehen und von der Funktion $f$ subtrahiert, so daß die Grundfunktion

$$h(x_1, x_2, x_3) = f(x_1, x_2, x_3) - \frac{1}{c}\, g(x_1, x_2, x_3) \tag{5}$$

entsteht.

Soll ein Extremwert vorliegen, müssen die drei Gleichungen

$$\left.\begin{aligned} \frac{1}{2}\frac{\partial h}{\partial x_1} &= x_1 - \frac{1}{c}(b_{11}x_1 + b_{12}x_2 + b_{13}x_3) = 0, \\ \frac{1}{2}\frac{\partial h}{\partial x_2} &= x_2 - \frac{1}{c}(b_{12}x_1 + b_{22}x_2 + b_{23}x_3) = 0, \\ \frac{1}{2}\frac{\partial h}{\partial x_3} &= x_3 - \frac{1}{c}(b_{13}x_1 + b_{23}x_2 + b_{33}x_3) = 0 \end{aligned}\right\} \tag{6}$$

erfüllt sein. Sie bilden ein homogenes lineares System zur Bestimmung von $x_1$, $x_2$, $x_3$, das nur bei verschwindender Koeffizientendeterminante lösbar ist. Nach Multiplikation jeder Gleichung mit $-c$ ergibt sich

$$\begin{vmatrix} b_{11} - c & b_{12} & b_{13} \\ b_{12} & b_{22} - c & b_{23} \\ b_{13} & b_{23} & b_{33} - c \end{vmatrix} = 0. \tag{7}$$

Die Lösungen seien mit $c_i$ $(i = 1, 2, 3)$ bezeichnet. Setzt man die Wurzeln $c_i$ nacheinander in jede der Gleichungen (6) ein und bestimmt die zugehörigen Lösungen $x_{i1}$, $x_{i2}$, $x_{i3}$, so ergeben sich die Scheitelpunkte.

Wir multiplizieren die erste Gleichung mit $x_1$, die zweite mit $x_2$, die dritte mit $x_3$. Es folgt unter Berücksichtigung von (2)

$$x_{i1}^2 + x_{i2}^2 + x_{i3}^2 = \frac{1}{c_i}. \tag{8}$$

Die Werte des LAGRANGEschen Multiplikators sind somit gleich den Summen der Quadrate über den Halbachsen. Legt man das $x, y, z$-Koordinatensystem in die Richtungen der aufein-

ander senkrecht stehenden Halbachsen, so erhält man

$$c_1x^2 + c_2y^2 + c_3z^2 = 1. \tag{9}$$

Geometrisch stellen die Gleichungen (6) Ebenen durch die Hauptachsen dar. Das Verschwinden der Koeffizientendeterminante gewährleistet, daß die sich drei Gleichungen (6) nicht widersprechen. Die Schnittgerade von je zwei Ebenen liefert eine Hauptachsenrichtung, desgleichen das Vektorprodukt von zwei Ebenennormalen.
Die Richtungscosinus der Normalen sind den Koeffizienten der Ebenengleichungen proportional. Benutzt man z. B. die erste und die dritte Gleichung (6), so ist die gesuchte Hauptachsenrichtung mit der Richtung des Vektors

$$\boldsymbol{b}_i = \begin{vmatrix} \boldsymbol{e}_1 & \boldsymbol{e}_2 & \boldsymbol{e}_3 \\ b_{11} - c_i & b_{12} & b_{13} \\ b_{13} & b_{23} & b_{33} - c_i \end{vmatrix} \tag{10}$$

identisch. Darin bedeuten $\boldsymbol{e}_1$, $\boldsymbol{e}_2$, $\boldsymbol{e}_3$ Einheitsvektoren in Richtung der $x_1$-, $x_2$-, $x_3$-Achse, d. h. bezogen auf das ursprüngliche System.
Im vorliegenden Fall ergibt sich aus (7)

$$(3 - c)\,[(13 - c)\,(8 - c) - 36] = 0$$

mit den Wurzeln

$$c_1 = 3,\; c_2 = 4,\; c_3 = 17.$$

Als Flächen zweiter Ordnung erhält man das Ellipsoid

$$3x^2 + 4y^2 + 17z^2 = 1.$$

Die Richtungen der Hauptachsen stimmen nach (10) mit den Richtungen der Vektoren

$$\boldsymbol{a}_1 = 0, \qquad \boldsymbol{a}_2 = \begin{vmatrix} \boldsymbol{e}_1 & \boldsymbol{e}_2 & \boldsymbol{e}_3 \\ -1 & 0 & 0 \\ 0 & -6 & 4 \end{vmatrix} = 4\boldsymbol{e}_2 + 6\boldsymbol{e}_3,$$

$$\boldsymbol{a}_3 = \begin{vmatrix} \boldsymbol{e}_1 & \boldsymbol{e}_2 & \boldsymbol{e}_3 \\ -14 & 0 & 0 \\ 0 & -6 & -9 \end{vmatrix} = -126\boldsymbol{e}_2 + 84\boldsymbol{e}_3$$

überein. Da $\boldsymbol{a}_2$ und $\boldsymbol{a}_3$ in der $\boldsymbol{e}_2, \boldsymbol{e}_3$-Ebene liegen, kann $\boldsymbol{a}_1 = \boldsymbol{e}_1$ gesetzt werden. Im ursprünglichen Koordinatensystem erhält man hiernach für die Richtungen der Hauptachsen die Einheitsvektoren

$$(1, 0, 0), \quad \frac{1}{\sqrt{52}}\,(0, 4, 6), \quad \frac{1}{\sqrt{2{,}29}}\,(0, -1{,}26, 0{,}84).$$

Sie sind die Eigenvektoren der Matrix $\boldsymbol{B}$.



## Aufgaben

A 3.1.1. Was bedeutet die Multiplikation einer Matrix mit einem konstanten Faktor? Wie ändert sich dabei die Determinante einer $n$-reihigen quadratischen Matrix?

A 3.1.2. Berechnen Sie $\lambda(\boldsymbol{A} + \boldsymbol{B})$.

A 3.1.3. Das Produkt zweier Zahlen ist nur dann gleich Null, wenn wenigstens einer der beiden Faktoren verschwindet. Gilt dieses Gesetz auch für Matrizen? Schreiben

Sie die zweireihige Nullmatrix

$$\boldsymbol{0} = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}$$

als Produkt zweier von der Nullmatrix verschiedener Matrizen.

A 3.1.4. Beweisen Sie, daß für die Multiplikation von Matrizen das assoziative Gesetz $\boldsymbol{A}(\boldsymbol{BC}) = (\boldsymbol{AB})\,\boldsymbol{C}$ erfüllt ist.

A 3.1.5. Zwei Matrizen $\boldsymbol{A}$ und $\boldsymbol{B}$ seien beide orthogonal. Untersuchen Sie, ob auch ihr Produkt $\boldsymbol{AB}$ orthogonal ist.

A 3.1.6. Zwei Vektoren $\boldsymbol{x}$ und $\boldsymbol{y}$ werden durch eine orthogonale Transformation substituiert. Wie verändert sich ihr Skalarprodukt?

A 3.1.7. Vorgegeben sei die lineare Vektorfunktion $\boldsymbol{y} = \boldsymbol{Bx}$ mit der dreireihigen Matrix $\boldsymbol{B}$. Welche Bedeutung haben $\boldsymbol{x}$ und $\boldsymbol{y}$ für die Fläche $\boldsymbol{y}'\boldsymbol{B}^{-1}\boldsymbol{y} = 1$?

A 3.1.8. Stellen Sie eine Formel zur Zerlegung einer Matrix $\boldsymbol{A}$ in eine symmetrische $\boldsymbol{A}_s$ und eine antimetrische $\boldsymbol{A}_a$ auf. Zerlegen Sie danach

$$\boldsymbol{A} = \begin{pmatrix} 2 & 1 & -1 \\ 0 & 3 & 2 \\ 1 & 1 & -1 \end{pmatrix}.$$

A 3.1.9. Untersuchen Sie die Wirkung zweier aufeinanderfolgender Spiegelungen $\sigma_1$ und $\sigma_2$, wenn die Spiegelebenen voneinander verschieden sind. Unter welcher Bedingung kann die Reihenfolge der Spiegelungen vertauscht werden?

A 3.1.10. Zwei aufeinanderfolgende Spiegelungen an der gleichen Ebene ergeben die Identität. Stellen Sie auf Grund dessen und nach A 3.1.9. zwei aufeinanderfolgende Drehungen $\boldsymbol{C}'(\psi')$ und $\boldsymbol{C}''(\psi'')$ um verschiedene Achsen durch zwei aufeinanderfolgende Spiegelungen $\sigma_1$, $\sigma_2$ und durch eine Drehung $\boldsymbol{C}(\psi)$ dar. Deuten Sie die Spiegelungen und die eine Drehung geometrisch.

A 3.1.11. Beweisen Sie auf Grund der Beziehung

$$\sum_i \sum_j a_{ij} b_{ji} = \sum_i \sum_j b_{ji} a_{ij},$$

daß die Spur des Matrizenproduktes $\boldsymbol{AB} = (a_{ij})\,(b_{ij})$ von der Reihenfolge der Faktoren unabhängig ist, selbst wenn diese nicht vertauscht werden können.

A 3.1.12. Beweisen Sie auf Grund der Beziehung

$$sp\boldsymbol{A} \cdot \boldsymbol{B} = sp\boldsymbol{B} \cdot \boldsymbol{A},$$

daß die Spur einer Matrix $\boldsymbol{B}$ gegenüber linearer Koordinatentransformation invariant ist.

A 3.1.13. Die Rotation um eine starre Achse ist durch den Rotationsvektor $\mathrm{d}\boldsymbol{w} = \boldsymbol{r} \times \mathrm{d}\boldsymbol{r}$ bestimmt ($\boldsymbol{r}$ Radiusvektor, $\mathrm{d}\boldsymbol{r}$ Verschiebungsvektor). Der Rotationsvektor $\mathrm{d}\boldsymbol{w}'$ ergibt sich bei einer Symmetrieoperation nach Transformation von $\boldsymbol{r}$ und von $\mathrm{d}\boldsymbol{r}$. Bestimmen Sie $\mathrm{d}\boldsymbol{w}'$ nach einer Drehung $\boldsymbol{C}(\varphi)$ und einer Drehspiegelung $\boldsymbol{S}(\varphi)$. Berechnen Sie die Spuren dieser Symmetrieoperationen auf den Rotationsvektor.

## 3.2. Optik anisotroper Medien

### E Einführung

*Dielektrizitätstensor*

Bei optisch anisotropen Medien haben das elektrische Feld $\boldsymbol{E}$ und die elektrische Flußdichte bzw. dielektrische Verschiebungsdichte $\boldsymbol{D}$ im allgemeinen verschiedene Richtungen. Der Zusammenhang zwischen diesen beiden Vektoren wird durch die

lineare Vektorfunktion

$$\boldsymbol{D} = \begin{pmatrix} D_1 \\ D_2 \\ D_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \varepsilon_{11} & \varepsilon_{12} & \varepsilon_{13} \\ \varepsilon_{21} & \varepsilon_{22} & \varepsilon_{23} \\ \varepsilon_{31} & \varepsilon_{32} & \varepsilon_{33} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} E_1 \\ E_2 \\ E_3 \end{pmatrix} = \boldsymbol{\varepsilon} \boldsymbol{E} \tag{1}$$

gegeben. Darin sind zueinander senkrechte Koordinatenrichtungen durch die Indizes 1, 2, 3 bei den Vektorkomponenten gekennzeichnet. An die Stelle der Dielektrizitätskonstanten $\varepsilon$ bei isotropen Medien tritt somit bei anisotropen Medien der zweistufige Dielektrizitätstensor $\boldsymbol{\varepsilon}$.
Schreibt man

$$\boldsymbol{D} = \boldsymbol{\varepsilon}_0 \boldsymbol{E} + \boldsymbol{P} = \varepsilon_0 \mathbf{1} \boldsymbol{E} + \boldsymbol{P}, \tag{1a}$$

so bezeichnet man $\boldsymbol{P}$ als den Polarisationsvektor. Seine Richtung weicht bei anisotropen Medien von der Richtung des elektrischen Feldes $\boldsymbol{E}$ ab.
Nach dem Poyntingschen Satz (vgl. [4] 1.4./20) bzw. (1.3./11) ist die zeitliche Ableitung der elektrischen Energiedichte gleich dem Skalarprodukt

$$\dot{w}_e = \boldsymbol{E} \cdot \dot{\boldsymbol{D}}. \tag{2}$$

Die Elemente $\varepsilon_{ik}$ des Dielektrizitätstensors sind konstant. Differenziert man die Feldkomponenten $D_1$, $D_2$, $D_3$ nach der Zeit $t$ und setzt die nach (1) sich ergebenden Größen in (2) ein, so folgt

$$\dot{w}_e = \sum_{i,j} \varepsilon_{ij} E_i \dot{E}_j. \tag{3}$$

Soll dieser Ausdruck die totale Ableitung

$$\dot{w}_e = \sum_i \frac{\partial w_e}{\partial E_i} \dot{E}_i \tag{4}$$

einer Funktion $w_e = w_e(E_1, E_2, E_3)$ nach der Zeit sein, so muß

$$\frac{\partial^2 w_e}{\partial E_i \, \partial E_j} = \frac{\partial^2 w_e}{\partial E_j \, \partial E_i}$$

für alle Werte $i$ und $j$ erfüllt sein. Das ist nur für

$$\varepsilon_{ij} = \varepsilon_{ji} \tag{5}$$

der Fall. Der Dielektrizitätstensor $\boldsymbol{\varepsilon}$ ist daher bei anisotropen Medien symmetrisch.

*Fresnelsches Ellipsoid*

Die Dichte der elektrischen Energie ist nach (1.3./11) bzw. [4] (1.4./23)

$$w_e = \frac{1}{2} \boldsymbol{E}\boldsymbol{D} = \frac{1}{2} \sum_{i,j} \varepsilon_{ij} E_i E_j = \frac{1}{2} \boldsymbol{E}' \boldsymbol{\varepsilon} \boldsymbol{E}. \tag{6}$$

Der Zusammenhang zwischen $\boldsymbol{E}$ und $\boldsymbol{D}$ läßt sich daher durch die quadratische Form

$$F(E_1, E_2, E_3) = \boldsymbol{E}'\boldsymbol{D} = \boldsymbol{E}'\boldsymbol{\varepsilon}\boldsymbol{E} = \sum_{i,j} \varepsilon_{ij} E_i E_j = 2 w_e = \text{const} \tag{7}$$

veranschaulichen. Im allgemeinen setzt man const = 1 J m$^{-3}$ und erhält damit aus (7) $E$ in V m$^{-1}$, bezogen auf die Energiedichte 0,5 J m$^{-3}$. (7) definiert das FRESNELsche Ellipsoid. $\boldsymbol{E}$ gibt darin den Radiusvektor an, $\boldsymbol{D}$ hat die Richtung der Flächennormalen (vgl. 3.1.5. sowie Bild 3.2.1).
Bei der **Transformation auf die Hauptachsen** $x$, $y$, $z$ ergibt sich nach 3.1. als Verknüpfung zwischen $\boldsymbol{D}$ und $\boldsymbol{E}$

$$\boldsymbol{D} = \begin{pmatrix} D_x \\ D_y \\ D_z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \varepsilon_{\mathrm{I}} & 0 & 0 \\ 0 & \varepsilon_{\mathrm{II}} & 0 \\ 0 & 0 & \varepsilon_{\mathrm{III}} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} E_x \\ E_y \\ E_z \end{pmatrix}. \tag{8}$$

$\varepsilon_{\mathrm{I}}$, $\varepsilon_{\mathrm{II}}$, $\varepsilon_{\mathrm{III}}$ heißen Hauptdielektrizitätskonstanten des anisotropen Körpers. Das FRESNELsche Ellipsoid (7) geht dabei für const = 1 J m$^{-3}$ in die Form

$$\varepsilon_{\mathrm{I}} E_x^2 + \varepsilon_{\mathrm{II}} E_y^2 + \varepsilon_{\mathrm{III}} E_z^2 = 1 \text{ J m}^{-3} \tag{9}$$

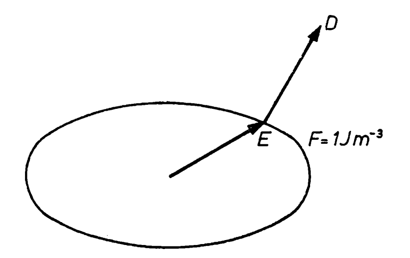



Bild 3.2.1. $\boldsymbol{E}$ und $\boldsymbol{D}$ im FRESNELschen Ellipsoid

über. Die Halbachsen sind gleich $\frac{1}{\sqrt{\varepsilon_{\mathrm{I}}}}, \frac{1}{\sqrt{\varepsilon_{\mathrm{II}}}}, \frac{1}{\sqrt{\varepsilon_{\mathrm{III}}}}$. Da in einem isotropen Körper die Lichtgeschwindigkeit gleich $\frac{c}{\sqrt{\varepsilon_{\mathrm{r}}}} = \frac{1}{\sqrt{\varepsilon\mu}}$ ist, heißen die Größen

$$u_{\mathrm{I}} = \frac{1}{\sqrt{\varepsilon_{\mathrm{I}}\mu_0}}, \qquad u_{\mathrm{II}} = \frac{1}{\sqrt{\varepsilon_{\mathrm{II}}\mu_0}}, \qquad u_{\mathrm{III}} = \frac{1}{\sqrt{\varepsilon_{\mathrm{III}}\mu_0}} \tag{10}$$

**Hauptlichtgeschwindigkeiten.** Analog bezeichnet man die Größen

$$n_{\mathrm{I}} = \sqrt{\frac{\varepsilon_{\mathrm{I}}}{\varepsilon_0}}, \qquad n_{\mathrm{II}} = \sqrt{\frac{\varepsilon_{\mathrm{II}}}{\varepsilon_0}}, \qquad n_{\mathrm{III}} = \sqrt{\frac{\varepsilon_{\mathrm{III}}}{\varepsilon_0}} \tag{11}$$

als **Hauptbrechzahlen.**

*Cauchysches Ellipsoid*

Durch Multiplikation mit der inversen Matrix $\boldsymbol{\varepsilon}^{-1}$ des Dielektrizitätstensors folgt aus (1)

$$\boldsymbol{E} = \boldsymbol{\varepsilon}^{-1}\boldsymbol{D}. \tag{12}$$

Bildet man nach (3.1./24) die quadratische Form

$$F(D_1, D_2, D_3) = \boldsymbol{D}'\boldsymbol{\varepsilon}^{-1}\boldsymbol{D} = 2w = \text{const}, \tag{13a}$$

so erhält man, bezogen auf die Hauptachsenrichtungen, als Gleichung der Tensorfläche für const $= \frac{1}{\varepsilon_0}$ A² s² m⁻⁴

$$F(D_1, D_2, D_3) = \frac{D_x^2}{n_I^2} + \frac{D_y^2}{n_{II}^2} + \frac{D_z^2}{n_{III}^2} = 1\ \mathrm{A^2\,s^2\,m^{-4}}. \tag{13}$$

Dieses Ellipsoid heißt CAUCHYsches Ellipsoid. Seine Halbachsen sind gleich den Hauptbrechzahlen bzw. -indizes. Es wird daher auch als **Indexellipsoid** bezeichnet. Der Radiusvektor zu einem Punkt auf dem Ellipsoid ist identisch mit dem Vektor $\boldsymbol{D}$ der dielektrischen Verschiebung. $\boldsymbol{E}$ hat die Richtung der Flächennormalen. In Bild 3.2.2 sind $\boldsymbol{D}$ und $\boldsymbol{E}$ für eine vorgegebene Richtung der dielektrischen Verschiebung $\boldsymbol{D}$ dargestellt.

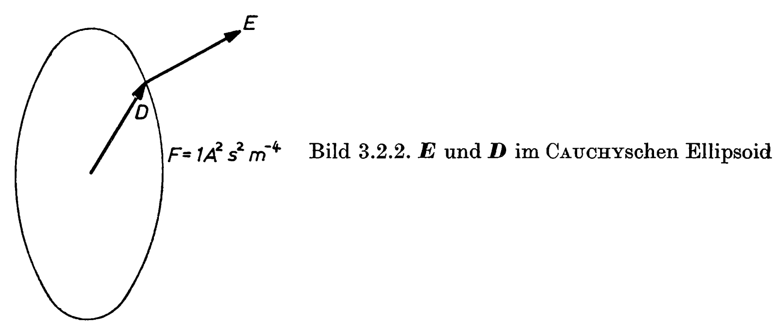



Bild 3.2.2. $\boldsymbol{E}$ und $\boldsymbol{D}$ im CAUCHYschen Ellipsoid

Die im anisotropen Körper unter der Richtung $\boldsymbol{n}$ fortschreitende elektrische Erregung $\boldsymbol{D}$ setzt sich aus zwei zueinander senkrecht polarisierten Teilwellen $\boldsymbol{D}_1$ und $\boldsymbol{D}_2$ zusammen, deren Phasengeschwindigkeiten $u_1$ und $u_2$ voneinander abweichen (vgl. 3.2.1.). Schneidet man das Indexellipsoid mit der durch den Flächenmittelpunkt gehenden, senkrecht zu $\boldsymbol{n}$ stehenden Ebene, so weisen die Hauptachsen der Schnittellipse in die Richtung von $\boldsymbol{D}_1$ und $\boldsymbol{D}_2$. Die Länge der Halbachse stimmt für

$$\boldsymbol{D}'\varepsilon^{-1}\boldsymbol{D} = \frac{1(\mathrm{A\,s})^2\,\mathrm{m^{-4}}}{\varepsilon_0}$$

mit den Beträgen $D_1$ und $D_2$ überein (vgl. A 3.2.2.).

## P Probleme

### 3.2.1. Ebene elektromagnetische Welle im anisotropen Medium

Rohrzucker hat für $\lambda = 589{,}3$ nm die Hauptbrechzahlen $n_I = 1{,}538$, $n_{II} = 1{,}565$, $n_{III} = 1{,}571$. Eine ebene elektromagnetische Welle breitet sich im Kristall derart aus, daß die Normale $\boldsymbol{n}$ der Flächen gleicher Phase diagonal zu den drei optischen Hauptachsen des Kristalls liegt. Stellen Sie die Formeln für die elektrische Feldstärke $\boldsymbol{E}$ und die dielektrische Verschiebung $\boldsymbol{D}$ sowie die magnetische Feldstärke $\boldsymbol{H}$ auf. Untersuchen Sie die Länge dieser Vektoren, und berechnen Sie die Richtung des Verschiebungsvektors $\boldsymbol{D}$.
Bestimmen Sie die Phasengeschwindigkeit der auftretenden elektromagnetischen Wellen.

**Lösung:**

Die MAXWELLschen Gleichungen für den strom- und ladungsfreien Kristall lauten

$$\dot{\boldsymbol{D}} = \operatorname{rot} \boldsymbol{H}, \tag{1}$$

$$\mu \dot{\boldsymbol{H}} = -\operatorname{rot} \boldsymbol{E}, \tag{2}$$

$$\operatorname{div} \boldsymbol{D} = 0, \tag{3}$$

$$\operatorname{div} \boldsymbol{H} = 0. \tag{4}$$

Wir gehen vom Ansatz einer ebenen elektromagnetischen Welle aus, die sich im Kristall in der Richtung $\boldsymbol{n}$ mit der Phasengeschwindigkeit $u$ fortpflanzt. Die Feldstärke ist

$$\boldsymbol{E} = \boldsymbol{E}_0 \, \mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega\left(t - \frac{\boldsymbol{r}\cdot\boldsymbol{n}}{u}\right)}, \tag{5}$$

wobei $\boldsymbol{r}$ den Ortsvektor kennzeichnet. $\boldsymbol{E}_0$ ist ein konstanter Vektor. Nach der allgemeinen Vektorbeziehung

$$\operatorname{rot} a\boldsymbol{b} = (\operatorname{grad} a) \times \boldsymbol{b} + a \operatorname{rot} \boldsymbol{b} \tag{6}$$

folgt aus (2), wenn hierin der Ansatz (5) eingesetzt wird,

$$\mu \dot{\boldsymbol{H}} = \mathrm{i}\mu\omega\boldsymbol{H} = \boldsymbol{E}_0 \times \operatorname{grad} \mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega\left(t - \frac{\boldsymbol{r}\cdot\boldsymbol{n}}{u}\right)} = -\boldsymbol{E}_0 \times \mathrm{i}\,\frac{\omega}{u}\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega\left(t - \frac{\boldsymbol{r}\cdot\boldsymbol{n}}{u}\right)}\boldsymbol{n} \tag{7}$$

bzw.

$$\boldsymbol{H} = \frac{1}{\mu u}\,\boldsymbol{n} \times \boldsymbol{E}. \tag{8}$$

Der magnetische Vektor steht somit auf der von $\boldsymbol{n}$ und $\boldsymbol{E}$ gebildeten Ebene senkrecht. Für den Vektor $\boldsymbol{D}$ folgt aus (1), (5) und (8)

$$\mathrm{i}\omega\boldsymbol{D} = \left(\frac{1}{\mu u} \operatorname{rot} \boldsymbol{n}\right) \times \boldsymbol{E}_0 \exp\left[\mathrm{i}\omega\left(t - \frac{\boldsymbol{r}\cdot\boldsymbol{n}}{u}\right)\right]. \tag{9}$$

Hierin kann nach (8)

$$\frac{1}{\mu u}\,\boldsymbol{n} \times \boldsymbol{E}_0 = \boldsymbol{H}_0 \tag{8a}$$

gesetzt werden. Damit ergibt sich in gleicher Weise wie bei der Ableitung von (7)

$$\boldsymbol{D} = -\frac{1}{u}\,\boldsymbol{n} \times \boldsymbol{H}_0 \exp\left[\mathrm{i}\omega\left(t - \frac{\boldsymbol{r}\cdot\boldsymbol{n}}{u}\right)\right] = -\frac{1}{\mu u^2}\,\boldsymbol{n} \times (\boldsymbol{n} \times \boldsymbol{E}). \tag{10}$$

$\boldsymbol{D}$ steht senkrecht auf $\boldsymbol{n}$. **Bezüglich $\boldsymbol{D}$ und $\boldsymbol{H}$ liegt eine transversale Welle vor.**
Auf Grund der Vektorbeziehung

$$\boldsymbol{a} \times (\boldsymbol{b} \times \boldsymbol{c}) = (\boldsymbol{a}\cdot\boldsymbol{c})\,\boldsymbol{b} - (\boldsymbol{a}\cdot\boldsymbol{b})\,\boldsymbol{c}$$

erhält man für $\mu = \mu_0$

$$\boldsymbol{D} = \frac{1}{\mu_0 u^2}\,[\boldsymbol{E} - (\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{E})\,\boldsymbol{n}] = \varepsilon_0 n^2 [\boldsymbol{E} - (\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{E})\,\boldsymbol{n}]. \tag{11}$$

$\boldsymbol{E}$, $\boldsymbol{D}$ und $\boldsymbol{n}$ liegen nach (11) in einer Ebene, auf der gemäß (8a) $\boldsymbol{H}$ senkrecht steht (vgl. Bild 3.2.1).
Wir ersetzen in (11) auf der rechten Seite $\boldsymbol{E}$ durch $\varepsilon^{-1}\boldsymbol{D}$. Bezeichnen $\cos\alpha$, $\cos\beta$, $\cos\gamma$ die Richtungscosinus der Ausbreitungsrichtung gegen die Hauptachsen, so folgt nach (11) für die Komponenten von $\boldsymbol{D}$ in den Hauptachsenrichtungen

$$D_x = \frac{\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{E}\cos\alpha}{\frac{1}{\varepsilon_\mathrm{I}} - \mu_0 u^2}, \qquad D_y = \frac{\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{E}\cos\beta}{\frac{1}{\varepsilon_\mathrm{II}} - \mu_0 u^2}, \qquad D_z = \frac{\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{E}\cos\gamma}{\frac{1}{\varepsilon_\mathrm{III}} - \mu_0 u^2}. \tag{12}$$

Wegen $\boldsymbol{D}\cdot\boldsymbol{n} = 0$ ergibt sich daraus

$$\boxed{\frac{\cos^2\alpha}{\frac{1}{\varepsilon_\mathrm{I}} - \mu_0 u^2} + \frac{\cos^2\beta}{\frac{1}{\varepsilon_\mathrm{II}} - \mu_0 u^2} + \frac{\cos^2\gamma}{\frac{1}{\varepsilon_\mathrm{III}} - \mu_0 u^2} = 0}. \tag{13}$$

Damit ist die Phasengeschwindigkeit $u$ als Funktion der Ausbreitungsrichtung $\boldsymbol{n}$ ($\cos\alpha$, $\cos\beta$, $\cos\gamma$) festgelegt. Nach (13) gehören zu einer vorgegebenen Ausbreitungsrichtung $\boldsymbol{n}$ der Phase zwei Phasengeschwindigkeiten $u_1$ und $u_2$, nach (12) zwei Vektoren $\boldsymbol{D}_1$ und $\boldsymbol{D}_2$. Führt man anstelle der Hauptdielektrizitätskonstanten die Hauptlichtgeschwindigkeiten ein, so erhält man aus (13) das **Fresnelsche Gesetz der Normalengeschwindigkeiten**

$$\boxed{\frac{\cos^2\alpha}{u_\mathrm{I}^2 - u^2} + \frac{\cos^2\beta}{u_\mathrm{II}^2 - u^2} + \frac{\cos^2\gamma}{u_\mathrm{III}^2 - u^2} = 0}. \tag{14}$$

Für das Verhältnis der Komponenten der dielektrischen Verschiebung folgt aus (12) bei bekannter Phasengeschwindigkeit $u$

$$\boxed{D_x : D_y : D_z = \frac{\cos\alpha}{u_\mathrm{I}^2 - u^2} : \frac{\cos\beta}{u_\mathrm{II}^2 - u^2} : \frac{\cos\gamma}{u_\mathrm{III}^2 - u^2}}. \tag{15}$$

Die Wurzeln dieser Gleichungen sind die Phasengeschwindigkeiten $u_1$, $u_2$ bzw. die elektrischen Erregungen $\boldsymbol{D}_1$, $\boldsymbol{D}_2$.
Nach (10) und (13) erhält man als Skalarprodukt der einer Ausbreitungsrichtung $\boldsymbol{n}$ zugeordneten elektrischen Erregungen

$$\boldsymbol{D}_1\cdot\boldsymbol{D}_2 = (\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{E}_1)(\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{E}_2)\left[\frac{\cos^2\alpha}{(u_\mathrm{I}^2 - u_1^2)(u_\mathrm{I}^2 - u_2^2)} + \frac{\cos^2\beta}{(u_\mathrm{II}^2 - u_1^2)(u_\mathrm{II}^2 - u_2^2)} + \frac{\cos^2\gamma}{(u_\mathrm{III}^2 - u_1^2)(u_\mathrm{III}^2 - u_2^2)}\right]. \tag{16}$$

Hieraus folgt durch Umformung

$$\boldsymbol{D}_1\cdot\boldsymbol{D}_2 = \frac{(\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{E}_1)(\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{E}_2)}{u_1^2 - u_2^2}\left\{\cos^2\alpha\left[\frac{1}{u_\mathrm{I}^2 - u_1^2} - \frac{1}{u_\mathrm{I}^2 - u_2^2}\right] + \cos^2\beta\left[\frac{1}{u_\mathrm{II}^2 - u_1^2} - \frac{1}{u_\mathrm{II}^2 - u_2^2}\right] + \cos^2\gamma\left[\frac{1}{u_\mathrm{III}^2 - u_1^2} - \frac{1}{u_\mathrm{III}^2 - u_2^2}\right]\right\}. \tag{17}$$

Nach (14) verschwinden sowohl die positiven als auch die negativen Summanden für sich, so daß man

$$\boxed{\boldsymbol{D}_1 \cdot \boldsymbol{D}_2 = 0} \tag{18}$$

erhält. Die $u_1$ und $u_2$ zugeordneten elektrischen Erregungen $\boldsymbol{D}_1$ und $\boldsymbol{D}_2$ stehen zueinander senkrecht.
Da sowohl $\boldsymbol{D}_1 \cdot \boldsymbol{n} = 0$ als auch $\boldsymbol{D}_2 \cdot \boldsymbol{n} = 0$ gilt, schwingen $\boldsymbol{D}_1$, $\boldsymbol{E}_1$ und $\boldsymbol{D}_2$, $\boldsymbol{E}_2$ in zueinander senkrechten Ebenen. Die $\boldsymbol{D}_2, \boldsymbol{E}_2$-Ebene geht aus der $\boldsymbol{D}_1, \boldsymbol{E}_1$-Ebene hervor, wenn diese um die Normale $\boldsymbol{n}$ um 90° gedreht wird. Somit stehen auch $\boldsymbol{H}_1$ und $\boldsymbol{H}_2$ zueinander senkrecht.
Mit den vorgegebenen Werten folgt

$$u_{\mathrm{I}} = \frac{c}{1{,}538} = 1{,}951 \cdot 10^8 \text{ m s}^{-1}, \qquad u_{\mathrm{II}} = 1{,}917 \cdot 10^8 \text{ m s}^{-1},$$

$$u_{\mathrm{III}} = 1{,}910 \cdot 10^8 \text{ m s}^{-1}.$$

Aus (14) ergibt sich nach Multiplikation mit $(u_{\mathrm{I}}^2 - u^2)\,(u_{\mathrm{II}}^2 - u^2)\,(u_{\mathrm{III}}^2 - u^2)$ im Falle $\cos\alpha = \cos\beta = \cos\gamma = \frac{1}{3}\sqrt{3}$ die biquadratische Gleichung $u^4 - 3{,}7098 \cdot 10^{16} \cdot 2u^2 + 1{,}3760 \cdot 10^{33} = 0$.

Sie hat die Lösungen

$$u_1 = 1{,}913 \cdot 10^8 \text{ m s}^{-1}, \qquad u_2 = 1{,}939 \cdot 10^8 \text{ m s}^{-1}.$$

Die negativen Wurzeln sind physikalisch ohne Bedeutung. Aus (15) erhalten wir nach Beseitigung des gemeinsamen Faktors $\frac{10^{-16}}{\sqrt{3}}$

$$D_{x1} : D_{y1} : D_{z1} = \frac{1}{1{,}951^2 - 1{,}913^2} : \frac{1}{1{,}917^2 - 1{,}913^2} : \frac{1}{1{,}910^2 - 1{,}913^2}$$

$$= 6{,}8 : 65 : (-87) = 0{,}0624 : 0{,}5994 : (-0{,}7941).$$

Ebenso folgt

$$D_{x2} : D_{y2} : D_{z2} = 0{,}8235 : (-0{,}4536) : (-0{,}3407).$$

In gleicher Weise lassen sich die Richtungen von $\boldsymbol{E}_1$ und $\boldsymbol{E}_2$ und daraus nach (8) die Richtungen von $\boldsymbol{H}_1$ und $\boldsymbol{H}_2$ bestimmen.

### 3.2.2. Poyntingscher Vektor und Strahlrichtung

Bestimmen Sie für Rohrzucker zu der mit ihrer Normalen $\boldsymbol{n}$ in Richtung der Raumdiagonalen des Hauptachsensystems fortschreitenden elektromagnetischen Welle die zugeordneten Strahlrichtungen. Wie groß ist die Geschwindigkeit $v$ der Energieströmung? Die Daten sind nach 3.2.1. einzusetzen.

**Lösung:**

Wir gehen von den Formeln in 3.2.1. aus. Der POYNTINGsche Vektor der Energiestromdichte ist

$$\boldsymbol{S} = \boldsymbol{E} \times \boldsymbol{H}. \tag{1}$$

Wir definieren den Einheitsvektor $\boldsymbol{s}$ in Strahlrichtung:

$$\boldsymbol{s} = \frac{\boldsymbol{S}}{S}. \tag{1a}$$

$\boldsymbol{S}$ bzw. $\boldsymbol{s}$ stehen senkrecht zu $\boldsymbol{H}$, liegen also in der von $\boldsymbol{D}$ und $\boldsymbol{n}$ aufgespannten Ebene, in der auch $\boldsymbol{E}$ liegt. Da $\boldsymbol{S}$ senkrecht zu $\boldsymbol{E}$ steht, erfolgt die Energieströmung gegen die Normalenrichtung $\boldsymbol{n}$ unter dem gleichen Winkel, den $\boldsymbol{E}$ mit $\boldsymbol{D}$ bildet (vgl. Bild 3.2.3). Für die Berechnung von $\boldsymbol{s}$ genügt es daher, $\cos(\boldsymbol{E}, \boldsymbol{D})$ zu bestimmen.
Hierzu ermitteln wir zunächst die Schwingungsrichtung der beiden elektrischen Vektoren $\boldsymbol{E}_1$ und $\boldsymbol{E}_2$. In (3.2.1./12) können $D_x$, $D_y$, $D_z$ durch $\varepsilon_\mathrm{I} E_x$, $\varepsilon_\mathrm{II} E_y$, $\varepsilon_\mathrm{III} E_z$ ersetzt werden. Daraus läßt sich unter Verwendung von (3.2./10) das Verhältnis der Komponenten des elektrischen Feldes berechnen:

$$E_x : E_y : E_z = \frac{u_\mathrm{I}^2 \cos\alpha}{u_\mathrm{I}^2 - u^2} : \frac{u_\mathrm{II}^2 \cos\beta}{u_\mathrm{II}^2 - u^2} : \frac{u_\mathrm{III}^2 \cos\gamma}{u_\mathrm{III}^2 - u^2} \tag{2}$$

bzw. nach (3.2.1./15)

$$E_x : E_y : E_z = u_\mathrm{I}^2 D_x : u_\mathrm{II}^2 D_y : u_\mathrm{III}^2 D_z. \tag{3}$$

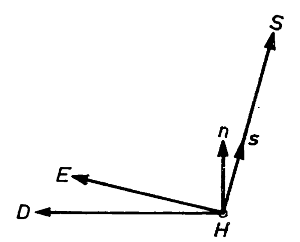



Bild 3.2.3. Lage der Vektoren $\boldsymbol{E}$, $\boldsymbol{D}$, $\boldsymbol{H}$, $\boldsymbol{S}$

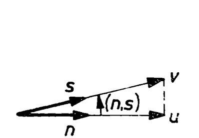



Bild 3.2.4. Normalen- und Strahlgeschwindigkeit

Für den Winkel zwischen $\boldsymbol{n}$ und $\boldsymbol{s}$ folgt daraus in Verbindung mit (3.2.1./15)

$$\sin(\boldsymbol{n}, \boldsymbol{s}) = \sqrt{1 - \frac{(\boldsymbol{D} \cdot \boldsymbol{E})^2}{D^2 E^2}}$$
$$= \frac{\sqrt{(u_\mathrm{I}^2 - u_\mathrm{II}^2)^2 D_x^2 D_y^2 + (u_\mathrm{I}^2 - u_\mathrm{III}^2)^2 D_x^2 D_z^2 + (u_\mathrm{II}^2 - u_\mathrm{III}^2)^2 D_y^2 D_z^2}}{\sqrt{D_x^2 + D_y^2 + D_z^2}\,\sqrt{u_\mathrm{I}^4 D_x^2 + u_\mathrm{II}^4 D_y^2 + u_\mathrm{III}^4 D_z^2}}. \tag{4}$$

Für die Strahlgeschwindigkeit im Kristall erhält man nach Bild 3.2.4

$$v = \frac{u}{\cos(\boldsymbol{n}, \boldsymbol{s})}. \tag{5}$$

Diese ist also mindestens gleich, im allgemeinen größer als die Phasen- bzw. Normalengeschwindigkeit.
Mit den in 3.2.1. errechneten Werten folgt aus (4) (der im Zähler und im Nenner auftretende Faktor $10^{16}$ kann weggelassen werden)

$$\sin(\boldsymbol{n}, \boldsymbol{s}_1) = \frac{\sqrt{\begin{aligned}&(1{,}951^2 - 1{,}917^2)^2\, 0{,}0624^2 \cdot 0{,}5994^2 + (1{,}951^2 - 1{,}910^2)^2\, 0{,}0624^2 \cdot 0{,}7941^2\\ &+ (1{,}917^2 - 1{,}910^2)^2\, 0{,}5994^2 \cdot 0{,}7941^2\end{aligned}}}{\sqrt{1{,}951^4 \cdot 0{,}0624^2 + 1{,}917^4 \cdot 0{,}5994^2 + 1{,}910^4 \cdot 0{,}7941^2}}$$
$$= 0{,}0043.$$

Ebenso folgt

$$\sin(\boldsymbol{n}, \boldsymbol{s}_2) = 0{,}0178.$$

Daraus erhält man

$$v_1 = 1{,}913 \cdot 10^8(1 + 10^{-5})\ \mathrm{m\,s^{-1}}, \qquad v_2 = 1{,}939(1 + 2 \cdot 10^{-4})\ \mathrm{m\,s^{-1}}.$$

### 3.2.3. Wellennormale und Strahlenfläche

Um die Verknüpfung zwischen dem elektrischen Feld $\boldsymbol{E}$ und der Strahlrichtung $\boldsymbol{s}$ darzustellen, definiert man den der Brechzahl $n = \dfrac{c}{u}$ analogen Ausdruck

$$\sigma = \frac{c}{v} = n \cos(\boldsymbol{n}, \boldsymbol{s}), \tag{1}$$

der als **Strahlungskoeffizient** oder **Strahlungsindex** bezeichnet wird. Leiten Sie unter Verwendung dieser Größe den Zusammenhang zwischen dem elektrischen Feld $\boldsymbol{E}$ und dem POYNTINGschen Vektor $\boldsymbol{S}$ ab. Stellen Sie die Gleichung für die Strahlgeschwindigkeit bei vorgegebener Strahlrichtung $\boldsymbol{s}$ auf.
Berechnen Sie die Strahlgeschwindigkeit in Rohrzucker für den in der $x,y$-Ebene diagonal zu den Achsen verlaufenden Strahl. Die Daten sind 3.2.1. zu entnehmen.

**Lösung:**

Nach Bild 3.2.3 besteht die Winkelbeziehung

$$(\boldsymbol{n}, \boldsymbol{s}) = (\boldsymbol{n}, \boldsymbol{E}) - \frac{\pi}{2}, \tag{2}$$

so daß man $\cos(\boldsymbol{n}, \boldsymbol{s})$ durch $\sin(\boldsymbol{n}, \boldsymbol{E})$ ersetzen kann. Damit folgt aus (1)

$$\frac{\sigma^2}{n^2} = 1 - \cos^2(\boldsymbol{n}, \boldsymbol{E}) = 1 - \frac{(\boldsymbol{n} \cdot \boldsymbol{E})^2}{\boldsymbol{E}^2} \tag{3}$$

bzw.

$$(\boldsymbol{n} \cdot \boldsymbol{E})^2 = \left(1 - \frac{\sigma^2}{n^2}\right) \boldsymbol{E}^2. \tag{3a}$$

Der POYNTINGsche Vektor $\boldsymbol{S} = \boldsymbol{E} \times \boldsymbol{H}$ der Energieströmung läßt sich wegen (3.2.1./8) in der Form

$$\boldsymbol{S} = \frac{1}{\mu_0 u} \boldsymbol{E} \times (\boldsymbol{n} \times \boldsymbol{E}) = \frac{1}{\mu_0 u} [\boldsymbol{E}^2 \boldsymbol{n} - (\boldsymbol{n} \cdot \boldsymbol{E}) \boldsymbol{E}] \tag{4}$$

schreiben. Darin ist $\mu = \mu_0$ gesetzt. Durch Auflösen nach $\boldsymbol{n}$ entsteht

$$\boldsymbol{n} = \frac{\mu_0 u}{\boldsymbol{E}^2} \frac{\boldsymbol{n} \cdot \boldsymbol{E}}{\boldsymbol{E}^2} \boldsymbol{E}. \tag{4a}$$

Andererseits kann in (3.2.1./1) $\boldsymbol{D} = \boldsymbol{\varepsilon} \boldsymbol{E}$ eingesetzt werden. Durch Umformen folgt

$$(\boldsymbol{\varepsilon} - \varepsilon_0 n^2 \boldsymbol{1}) \boldsymbol{E} = -\varepsilon_0 n^2 (\boldsymbol{n} \cdot \boldsymbol{E}) \boldsymbol{n}. \tag{5}$$

Hierin läßt sich der Einheitsvektor $\boldsymbol{n}$ gemäß (4a) einsetzen. Ferner kann man die Koeffizienten

des elektrischen Feldes $\boldsymbol{E}$ zusammenfassen. In Verbindung mit (3a) ergibt sich

$$(\varepsilon - \varepsilon_0\sigma^2\boldsymbol{1}) = -n\,\frac{\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{E}}{\boldsymbol{E}^2}\,\boldsymbol{S}, \tag{6}$$

womit die gesuchte Verknüpfung zwischen $\boldsymbol{E}$ und $\boldsymbol{S}$ hergeleitet ist. Bezogen auf die Hauptachsen, erhält man aus (6) die Gleichungen

$$\left.\begin{aligned} E_x &= -n\,\frac{\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{E}S_x}{\boldsymbol{E}^2(\varepsilon_{\mathrm{I}} - \varepsilon_0\sigma^2)}, \\ E_y &= -n\,\frac{\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{E}S_y}{\boldsymbol{E}^2(\varepsilon_{\mathrm{II}} - \varepsilon_0\sigma^2)}, \\ E_z &= -n\,\frac{\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{E}S_z}{\boldsymbol{E}^2(\varepsilon_{\mathrm{III}} - \varepsilon_0\sigma^2)}. \end{aligned}\right\} \tag{7}$$

Da $\boldsymbol{E}\cdot\boldsymbol{S}$ verschwindet, gelangt man durch Multiplikation mit $S_x$, $S_y$, $S_z$ und Addition nach Beseitigung des gemeinsamen Faktors auf die Gleichung

$$\frac{s_x^2}{\dfrac{1}{u_{\mathrm{I}}^2} - \dfrac{1}{v^2}} + \frac{s_y^2}{\dfrac{1}{u_{\mathrm{II}}^2} - \dfrac{1}{v^2}} + \frac{s_z^2}{\dfrac{1}{u_{\mathrm{III}}^2} - \dfrac{1}{v^2}} = 0. \tag{8}$$

Bei vorgegebener Strahlrichtung $\boldsymbol{s}$ hat diese Gleichung im allgemeinen zwei voneinander abweichende Lösungen für $v$.
Bei bekannten Werten $v = v_{1,2}$ folgt aus (7)

$$E_x : E_y : E_z = \frac{s_x}{\dfrac{1}{u_{\mathrm{I}}^2} - \dfrac{1}{v^2}} : \frac{s_y}{\dfrac{1}{u_{\mathrm{II}}^2} - \dfrac{1}{v^2}} : \frac{s_z}{\dfrac{1}{u_{\mathrm{III}}^2} - \dfrac{1}{v^2}}. \tag{9}$$

(8) und (9) gehen aus (3.2.1./14) und (3.2.1./15) durch die Vertauschung

$$\begin{pmatrix} \boldsymbol{n} & u_{\mathrm{I}} & u_{\mathrm{II}} & u_{\mathrm{III}} & u & \boldsymbol{D} \\ \boldsymbol{s} & \dfrac{1}{u_{\mathrm{I}}} & \dfrac{1}{u_{\mathrm{II}}} & \dfrac{1}{u_{\mathrm{III}}} & \dfrac{1}{v} & \boldsymbol{E} \end{pmatrix} \tag{10}$$

hervor.
(8) kennzeichnet die Strahlenfläche. Die für die Normalenfläche in 3.2.1. abgeleiteten Beziehungen zwischen $\boldsymbol{n}$ und $\boldsymbol{D}$ lassen sich mit Hilfe von (10) auf $\boldsymbol{s}$ und $\boldsymbol{E}$ übertragen.
Für $s_x = s_y = \dfrac{1}{\sqrt{2}}$, $s_z = 0$ ergibt sich aus (8)

$$v_1 = \frac{\sqrt{2}\,u_{\mathrm{I}}u_{\mathrm{II}}}{\sqrt{u_{\mathrm{I}}^2 + u_{\mathrm{II}}^2}}, \qquad v_2 = v_{\mathrm{II}},$$

mit den vorgegebenen Werten

$$v_1 = \frac{1{,}414 \cdot 1{,}951 \cdot 1{,}917}{\sqrt{1{,}951^2 + 1{,}917^2}}\, 10^8\ \mathrm{m\,s^{-1}} = 1{,}934 \cdot 10^8\ \mathrm{m\,s^{-1}}, \quad v_2 = 1{,}910 \cdot 10^8\ \mathrm{m\,s^{-1}}.$$

## 3.2.4. Ordentlicher und außerordentlicher Strahl einachsiger Kristalle

Optisch einachsige Kristalle unterscheiden sich von optisch zweiachsigen dadurch, daß zwei Hauptlichtgeschwindigkeiten bzw. zwei Hauptdielektrizitätskonstanten gleich sind:

$$u_{\mathrm{I}} = u_{\mathrm{II}}, \qquad \varepsilon_{\mathrm{I}} = \varepsilon_{\mathrm{II}}. \tag{1}$$

Das FRESNELsche Ellipsoid und das Indexellipsoid werden zu Rotationsellipsoiden mit der $z$-Achse als Symmetrieachse. Von den beiden sich ergebenden Strahlen stimmen für den einen die Richtung der dielektrischen Verschiebung $\boldsymbol{D}$ und die der elektrischen Feldstärke $\boldsymbol{E}$ überein. Er wird als **ordentlicher Strahl** bezeichnet. Beim außerordentlichen Strahl weichen die Richtungen von $\boldsymbol{D}$ und $\boldsymbol{E}$ voneinander ab.
Stellen Sie die Formel für das Feld der ordentlichen und das der außerordentlichen Welle auf.
Bei Kalkspat ist für $\lambda = 589{,}3$ nm die Hauptbrechzahl des ordentlichen Strahles $n_0 = n_{\mathrm{I}} = n_{\mathrm{II}} = 1{,}6548$, die des außerordentlichen Strahles $n_e = n_{\mathrm{III}} = 1{,}4864$. Berechnen Sie für den außerordentlichen Strahl den Winkel zwischen der Normalen- und der Strahlrichtung für $\boldsymbol{n} = \left(\frac{1}{\sqrt{2}}, 0, \frac{1}{\sqrt{2}}\right)$. Wie groß ist das Verhältnis zwischen Normalen- und Strahlengeschwindigkeit?

**Lösung:**

Das FRESNELsche Gesetz (3.2.1./14) der Normalengeschwindigkeiten kann für $u_{\mathrm{I}} = u_{\mathrm{II}}$ wegen $\cos^2\alpha + \cos^2\beta = \sin^2\gamma$ in der Form

$$(u_{\mathrm{I}}^2 - u^2)\,[(u_{\mathrm{III}}^2 - u^2)\sin^2\gamma + (u_{\mathrm{I}}^2 - u^2)\cos^2\gamma] = 0 \tag{2}$$

geschrieben werden. Als Wurzeln dieser Gleichung erhält man

$$u_1^2 = u_{\mathrm{I}}^2, \qquad u_2^2 = u_{\mathrm{I}}^2\cos^2\gamma + u_{\mathrm{III}}^2\sin^2\gamma. \tag{3}$$

Um die Richtungen der Vektoren $\boldsymbol{D}$ und $\boldsymbol{E}$ zu bestimmen, betrachten wir den Grenzfall $u_{\mathrm{II}} \to u_{\mathrm{I}}$. Wegen $u_1 = u_{\mathrm{I}}$ kann in (3.2.1./14) der dritte Summand gegen die ersten beiden, in denen der Nenner verschwindet, vernachlässigt werden. Hieraus folgt

$$\lim_{u_{\mathrm{II}}\to u_{\mathrm{I}}}\left(\frac{\cos^2\alpha}{u_{\mathrm{I}}^2 - u_1^2} + \frac{\cos^2\beta}{u_{\mathrm{II}}^2 - u_1^2}\right) = 0 \quad \text{bzw.} \quad \lim_{u_{\mathrm{II}}\to u_{\mathrm{I}}}\frac{u_{\mathrm{I}}^2 - u_1^2}{u_{\mathrm{II}}^2 - u_1^2} = -\frac{\cos^2\alpha}{\cos^2\beta}. \tag{4}$$

Damit ergibt sich nach (3.2.1./15)

$$D_{x1} : D_{y1} : D_{z1} = \frac{1}{\cos\alpha} : \frac{-1}{\cos\beta} : 0. \tag{5}$$

Ebenso folgt aus (3.2.2./2)

$$E_{x1} : E_{y1} : E_{z1} = \frac{1}{\cos\alpha} : \frac{-1}{\cos\beta} : 0. \tag{6}$$

Die erste Wurzel $u_1 = u_{\mathrm{I}}$ der Gleichung (2) führt somit auf die ordentliche Welle, bei der $\boldsymbol{D}$ und $\boldsymbol{E}$ gleichgerichtet sind und senkrecht zur Symmetrieachse schwingen.
Für die außerordentliche Welle folgt nach (3.2.1./15) und (3.2./10)

$$D_{x2} : D_{y2} : D_{z2} = \cos\alpha : \cos\beta : (-\tan^2\gamma\cos\gamma), \tag{7}$$

$$E_{x2} : E_{y2} : E_{z2} = \cos\alpha : \cos\beta : \left(-\frac{u_{\mathrm{III}}^2}{u_{\mathrm{I}}^2}\tan^2\gamma\cos\gamma\right). \tag{8}$$

Da $\boldsymbol{D}_1$ und $\boldsymbol{E}_1$ gleichgerichtet sind, stimmen bei der ordentlichen Welle $\boldsymbol{n}$ und $\boldsymbol{s}$ überein. Bei der außerordentlichen Welle folgt nach (3.2.2./4)

$$\sin(\boldsymbol{n}, \boldsymbol{s}) = \sqrt{\frac{(u_{\mathrm{I}}^2 - u_{\mathrm{III}}^2)^2 \sin^2\gamma \cos^2\gamma}{u_{\mathrm{I}}^4 \cos^2\gamma + u_{\mathrm{III}}^4 \sin^2\gamma}} = \sqrt{\frac{(n_{\mathrm{I}}^2 - n_{\mathrm{III}}^2)^2 \sin^2\gamma \cos^2\gamma}{n_{\mathrm{III}}^4 \cos^2\gamma + n_{\mathrm{I}}^4 \sin^2\gamma}}. \tag{9}$$

Im vorgegebenen Fall gilt

$$\sin(\boldsymbol{n}, \boldsymbol{s}) = \sqrt{\frac{(1{,}6548^2 - 1{,}4864^2)^2\, 0{,}5 \cdot 0{,}5}{(1{,}6548^4 + 1{,}4864^4)\, 0{,}5}} = 0{,}106$$

und daraus für das Verhältnis zwischen Strahlen- und Normalengeschwindigkeit

$$\frac{v}{u} = \frac{1}{\sqrt{1 - 0{,}106^2}} = 1{,}0056.$$

## 3.2.5. Viertelwellenlängenblättchen

Um die Polarisation einfarbigen Lichtes zu bestimmen, läßt man dieses senkrecht auf eine Quarzplatte und danach auf ein Nicolsches Prisma (vgl. A 3.2.1.) fallen. In der Quarzplatte wird das elliptisch polarisierte in linear polarisiertes Licht umgewandelt. Das Nicolsche Prisma läßt nur eine bestimmte Schwingungsrichtung des Lichtes durchgehen und dient damit als Analysator.
Wie dick ist die Quarzplatte zu wählen und wie ist sie zu drehen, um die Überführung elliptisch polarisierten Lichtes in linear polarisiertes zu gewährleisten?
Bei der Untersuchung des elliptisch polarisierten Lichtes sei die Platte um 30°, das Nicolsche Prisma um 90° mit der Vertikalen als Achse zu verdrehen, um Auslöschung zu erzielen. Bestimmen Sie die Schwingung des einfallenden Lichtes. Die Wellenlänge sei $\lambda_0 = 589$ nm. Quarz hat die Brechzahlen $n_0 = 1{,}5442$, $n_e = 1{,}5533$.

**Lösung:**

Die Quarzplatte wird so verdreht, daß die Hauptachsen der Schwingungsellipse mit den Schwingungsrichtungen des ordentlichen und des außerordentlichen Strahles zusammenfallen. Die $z$-Achse werde normal zur Plattenoberfläche gewählt. Wir legen die $x$- und die $y$-Achse so, daß diese parallel zu den Hauptachsen der Schwingungsachse liegen und können daher schreiben

$$D_x^{\mathrm{e}} = D_1 \cos\omega t, \qquad D_y^{\mathrm{e}} = D_2 \sin\omega t. \tag{1}$$

Nach Durchgang durch die Platte tritt infolge der verschiedenen Geschwindigkeiten eine Phasenverschiebung auf:

$$D_x^{\mathrm{d}} = D_1 \cos(\omega t + \delta_1), \qquad D_y^{\mathrm{d}} = D_2 \sin(\omega t + \delta_2). \tag{2}$$

Das austretende Licht ist linear polarisiert, wenn

$$\delta = \delta_1 - \delta_2 = \pm\frac{\pi}{2} \tag{3}$$

ist. Man erhält dann

$$\left|\frac{D_y^{\mathrm{d}}}{D_x^{\mathrm{d}}}\right| = \left|\frac{D_2}{D_1}\right|. \tag{4}$$

Bezeichnet $d$ die Dicke der Kristallplatte, so gilt

$$\delta_1 = \frac{2\pi}{\lambda_0} n_1 d, \qquad \delta_2 = \frac{2\pi}{\lambda_0} n_2 d. \tag{5}$$

Darin kennzeichnen $n_1$ und $n_2$ die Brechzahlen der ordentlichen und der außerordentlichen Welle. Nach (3) folgt für die erforderliche Dicke $d$ der Viertelwellenlängenplatte

$$d = \frac{\lambda}{4} \frac{1}{|n_1 - n_2|} \quad \text{bzw.} \quad d = \frac{\lambda_0}{4} \frac{1}{|n_o - n_e|}. \tag{6}$$

Bei richtiger Einstellung der Platte ist das durchgehende Licht linear polarisiert. Durch Verdrehung des Analysators wird das Gesichtsfeld auf dunkel eingestellt. Die durchgelassene Schwingungsrichtung des Nicols steht senkrecht zu der des linear polarisiert austretenden Strahles (vgl. Bild 3.2.5).

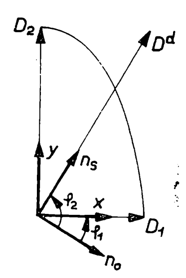



Bild 3.2.5. Schwingungsrichtung des ordentlichen und des außerordentlichen Strahles ($x$-, $y$-Achse), Schwingungsrichtung $\boldsymbol{D}^d$ des linear polarisierten durchgelassenen Lichtes, $\boldsymbol{n}_S$ Sperrichtung des NICOLschen Prismas, $\boldsymbol{n}_0$ Bezugsrichtung

Im vorliegenden Fall muß die Dicke der Platte

$$d = \frac{589 \cdot 10^{-9}}{4} \frac{1}{|1{,}5533 - 1{,}5442|} \text{ m} = 16{,}2 \text{ µm}$$

betragen. Aus ihrer Verdrehung folgt, daß die Hauptachsen der Schwingungsellipse unter 30° bzw. −60° gegen die Vertikale geneigt sind. Die notwendige Drehung des Analysators bedeutet, daß danach das durchgehende Licht in der Sperrichtung, im vorliegenden Fall also unter 60° gegen die $x$-Achse schwingt. Es ist daher

$$\left|\frac{D_y}{D_x}\right| = \left|\frac{D_2}{D_1}\right| = \tan 60° = 1{,}732.$$

## 3.2.6. Reflexion und Brechung am Kristall

Auf Kalkspat trifft ein Lichtstrahl und wird hier gebrochen und reflektiert. Das Flächenlot habe die Richtung einer Hauptachse:

$$\boldsymbol{n} = \boldsymbol{n}_L = (\cos a, \cos b, \cos c) = (1, 0, 0).$$

Der einfallende Strahl sei durch den Einheitsvektor

$$\frac{\boldsymbol{k}_e}{k_e} = \boldsymbol{e} = (\cos \alpha_0, \cos \beta_0, \cos \gamma_0) = \left(\frac{1}{\sqrt{2}}, 0, -\frac{1}{\sqrt{2}}\right)$$

festgelegt. Bestimmen Sie die Richtung der ordentlichen und die der außerordentlichen Welle im Kristall. Daten sind nach 3.2.4. einzusetzen.

**Lösung:**

Die Überlegungen nach 2.1. über die Reflexion und Brechung gelten für isotrope und anisotrope Medien. Aus den Grenzbedingungen folgt die Stetigkeit der Tangentialkomponenten von $\boldsymbol{E}$ und $\boldsymbol{H}$. Hieraus erhält man auch für anisotrope Medien das Reflexions- und das Brechungsgesetz in den Formen (2.1.1./11) und (2.1.1./12) zusammen mit der Aussage (2.1./18) und (2.1./19), daß einfallender und reflektierter Strahl sowie jeder der beiden gebrochenen Strahlen und das Flächenlot in einer Ebene liegen.
Das Brechungsgesetz $k_e \sin \alpha_0 = k_d \sin \alpha_d$ nach (2.1.1./12) und die Aussage (2.1./19) über die Lage der Strahlen werden in der Form

$$\boldsymbol{k}_d \times \boldsymbol{n} = \boldsymbol{k}_e \times \boldsymbol{n} \tag{1}$$

zusammengefaßt. Führt man die Brechzahlen $n_1$ und $n_2$ sowie die Richtungen $\boldsymbol{n}_1 = (\cos \alpha_1, \cos \beta_1, \cos \gamma_1) = \frac{\boldsymbol{k}_{d1}}{k_{d1}}$ und $\boldsymbol{n}_2 = (\cos \alpha_2, \cos \beta_2, \cos \gamma_2) = \frac{\boldsymbol{k}_{d2}}{k_{d2}}$ der beiden gebrochenen Wellen ein, so kann man anstelle (1) auch

$$n_i \boldsymbol{n}_i \times \boldsymbol{n} = \boldsymbol{e} \times \boldsymbol{n} \qquad (i = 1, 2) \tag{1a}$$

schreiben. Zerlegt man (1a) in die Komponenten, so ergibt sich

$$n_i(\cos \beta_i \cos c - \cos \gamma_i \cos b) = \cos \beta_0 \cos c - \cos \gamma_0 \cos b, \tag{2}$$

$$n_i(\cos \alpha_i \cos c - \cos \gamma_i \cos a) = \cos \alpha_0 \cos c - \cos \gamma_0 \cos a, \tag{3}$$

$$n_i(\cos \alpha_i \cos b - \cos \beta_i \cos a) = \cos \alpha_0 \cos b - \cos \beta_0 \cos a. \tag{4}$$

Diese Gleichungen können als System zur Bestimmung der drei unbekannten Größen $\cos \alpha_i$, $\cos \beta_i$, $\cos \gamma_i$ aufgefaßt werden. Für die Koeffizientendeterminante folgt der Wert Null. Es ist daher einer der unbekannten Richtungscosinus zunächst willkürlich festzulegen. Wählt man dafür $\cos \alpha_i$, so hängen nach (2) und (4) die andern beiden Richtungscosinus gemäß

$$\cos \gamma_i = \frac{\cos c(n_i \cos \alpha_i - \cos \alpha_0) + \cos \gamma_0 \cos a}{n_i \cos a}, \tag{5}$$

$$\cos \beta_i = \frac{\cos b(n_i \cos \alpha_i - \cos \alpha_0) + \cos \beta_0 \cos a}{n_i \cos a} \tag{6}$$

von $\cos \alpha_i$ ab. Die genauen Werte folgen auf Grund der Beziehung

$$\cos^2 \alpha_i + \cos^2 \beta_i + \cos^2 \gamma_i = 1.$$

Bei Kristallen ist $\boldsymbol{n}_i$ im Gegensatz zu isotropen Medien nicht bekannt. Zur Bestimmung der Ausbreitungsrichtungen haben wir das Fresnelsche Gesetz (3.2.1./14) über die Normalengeschwindigkeiten heranzuziehen.
Bei optisch einachsigen Kristallen zerfällt dieses Gesetz nach (3.2.4./3) in zwei Gleichungen, die wir in der Form

$$n_1 = n_{\mathrm{I}}, \qquad \frac{1}{n_2^2} = \frac{1}{n_{\mathrm{I}}^2} \cos^2 \gamma_2 + \frac{1}{n_{\mathrm{II}}^2} \sin^2 \gamma_2 \tag{7}$$

schreiben können. Während hiernach die Brechzahl der ordentlichen Welle festliegt, hängt die Brechzahl der außerordentlichen Welle von der Ausbreitungsrichtung ab, die selbst noch zu bestimmen ist. Hierzu sind die Richtungscosinus in (7) bzw. bei zweiachsigen Kristallen in (3.2.1./14) einzusetzen.

Im vorliegenden Fall $\cos b = 0$, $\cos c = 0$ erhalten wir aus (5) und (6) ebenso wie aus (3) und (4) unabhängig von $\cos \alpha_i$

$$\cos \gamma_i = \frac{\cos \gamma_0}{n_i}, \qquad \cos \beta_i = \frac{\cos \beta_0}{n_i}. \tag{8}$$

Für die außerordentliche Welle folgt damit aus der zweiten Gleichung (7)

$$n_2{}^2 = n_{\text{II}}^2 + \cos^2 \gamma \left(1 - \frac{n_{\text{II}}^2}{n_{\text{I}}{}^2}\right). \tag{9}$$

Mit den vorgegebenen Zahlen erhalten wir aus (9)

$$n_2 = \sqrt{1{,}4864^2 + \frac{1}{2}\left(1 - \frac{1{,}4864^2}{1{,}6548^2}\right)} = 1{,}5186$$

und daraus

$$\cos \gamma_2 = -\frac{0{,}7071}{1{,}5186} = -0{,}4656,$$

ferner

$$\cos \beta_2 = 0, \qquad \cos \alpha_2 = 0{,}8851.$$

Für die ordentliche Welle ergibt sich mit $n_1 = n_{\text{I}}$

$$\boldsymbol{n}_1 = (0{,}9042,\ 0,\ -0{,}4273).$$

## Aufgaben

A 3.2.1. Geben Sie die Elemente des Tensors $\boldsymbol{\varepsilon}^{-1}$ für ein Koordinatensystem in den Hauptachsenrichtungen an.

A 3.2.2. Die Gleichung $\boldsymbol{D} \cdot \boldsymbol{n} = 0$ bzw. in den Hauptachsenrichtungen

$$D_x \cos \alpha + D_y \cos \beta + D_z \cos \gamma = 0$$

stellt eine Ebene im $D_x, D_y, D_z$-Raum dar, die das Indexellipsoid schneidet. Beweisen Sie, daß die Hauptachsenrichtungen der Schnittellipse mit den beiden Richtungen von $\boldsymbol{D}_1$ und $\boldsymbol{D}_2$ identisch sind, und berechnen Sie die Länge der Vektoren für $2w\varepsilon_0 = 1$ (A s m$^{-2}$)$^2$. Dabei ist davon auszugehen, daß $\boldsymbol{D}^2$ in Richtung der Ellipsenachsen einen Extremwert annimmt.

A 3.2.3. Bestimmen Sie aus den FRESNELschen Gleichungen der Normalengeschwindigkeiten und aus dem FRESNELschen Ellipsoid die Phasengeschwindigkeiten $u$, die Richtungen der dielektrischen Verschiebung und die Richtungen der magnetischen Feldstärke, wenn die Wellenflächennormale $\boldsymbol{n}$ in Richtung der Hauptachse $x$ weist.

A 3.2.4. **Optische Achsen.** Bestimmen Sie die Richtungen der Wellenflächennormalen $\boldsymbol{n}$, für die die beiden Phasengeschwindigkeiten $u_1$ und $u_2$ gleich sind ($u_{\text{I}} > u_{\text{II}} > u_{\text{III}}$). Diese Richtungen heißen optische Achsen. — Wie viele optische Achsen erhält man für $u_{\text{I}} = u_{\text{II}}$?

A 3.2.5. Wieviel mögliche Schwingungsrichtungen $\boldsymbol{D}$ ergeben sich, wenn $\boldsymbol{n}$ in Richtung einer optischen Achse liegt?

A 3.2.6. Untersuchen Sie die ordentliche und die außerordentliche Welle für einen einachsigen Kristall mit den Hauptdielektrizitätskonstanten $\varepsilon_{I} = \varepsilon_{II}, \varepsilon_{III}$, wenn die Ausbreitung des Lichtes in der Symmetrieachse ($z$-Achse) erfolgt. Wie verändert eine linear polarisiert einfallende Welle ihre Schwingungsform?

A 3.2.7. Leiten Sie für den optisch zweiachsigen Kristall eine Beziehung zwischen den Winkeln $\Omega_1$ und $\Omega_2$ der beiden optischen Achsen gegen die Normale $\boldsymbol{n}$ und den zugehörigen Phasengeschwindigkeiten $u_1$ und $u_2$ ab.

A 3.2.8. Wie viele Strahlengeschwindigkeiten existieren zu einer vorgegebenen Richtung des POYNTINGschen Vektors $\boldsymbol{S}$? Wie verhalten sich die zugeordneten elektrischen Feldstärken?

A 3.2.9. In einem optisch zweiachsigen Kristall weise die Wellennormale $\boldsymbol{n}$ in Richtung einer der optischen Achsen. Wie viele Strahlenrichtungen sind dieser Normalenrichtung zugeordnet?

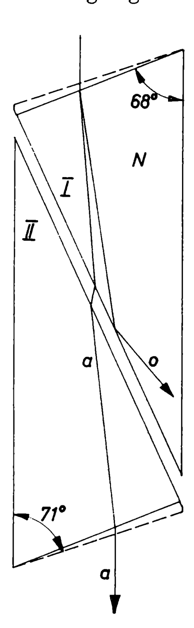



Bild 3.2.6. NICOLsches Prisma

A 3.2.10. Wie viele Normalen gehören zu einem vorgegebenen POYNTINGschen Vektor in Richtung einer der optischen Achsen?

A 3.2.11. **Nicolsches Prisma.** Die Endflächen des Spaltungsrhomboeders von Kalkspat $CaCO_3$ werden so abgeschliffen, daß sie mit den langen Kanten anstelle des natürlichen Winkels von 70° 52′ nur noch einen Winkel von 68° bilden. Das entstandene Parallelepiped wird gemäß Bild 3.2.6 in zwei Teile zerschnitten und durch eine planparallele Schicht Kanadabalsam wieder zusammengeklebt. Dieser hat die Brechzahl $n_K = 1{,}55$. Die beiden Hauptbrechzahlen des Kalkspats sind $n_o = 1{,}66$, $n_e = 1{,}49$. Ein Strahl natürlichen Lichtes fällt, aus dem Vakuum kommend, parallel zur Längskante auf die Endfläche. Untersuchen Sie den weiteren Verlauf des Strahles in der Anordnung.

A 3.2.12. **Elektrooptische Effekte** verändern die Brechzahl $n$ unter dem Einfluß eines starken elektrischen Feldes. Beim **Pockels-Effekt** ist die Änderung von $n$ proportional dem angelegten Feld. Liegt $\boldsymbol{E}$ in Richtung der optischen Kristallachse eines einachsigen Kristalls, so wird dieser zweiachsig. Die Brechzahl $n_0$ zerfällt

in die beiden Hauptbrechzahlen

$$n_1 = n_0 + aE$$
$$n_2 = n_0 - aE$$

mit

$$a = \frac{1}{2} n_0^3 r_{63}.$$

Beim KDP-Kristall mit $n_0 = 1{,}468$ ist $r_{63} = -10{,}5 \cdot 10^{-12}\ \mathrm{V^{-1}\,m}$ ($\lambda_0 = 556$ nm, 88 °C).
Welches elektrische Feld ist anzulegen, um durch den elektrooptischen Effekt eine Differenz der Brechzahlen in der Größe $10^{-4}$ zu erzielen?

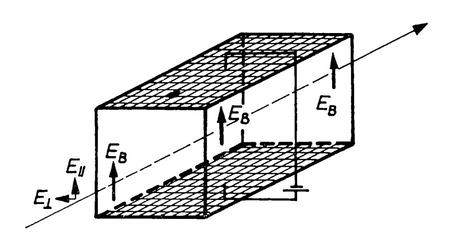



Bild 3.2.7. KERR-Zelle

A 3.2.13. Einige Materialien zeigen den **quadratischen elektrooptischen Kerr-Effekt.** Die Brechzahl $n_s$ für einen Lichtstrahl, bei dem $\boldsymbol{D}$ senkrecht zum angelegten Feld $\boldsymbol{E}_0$ schwingt, weicht von der Brechzahl $n_p$ mit parallel zu $\boldsymbol{E}_0$ schwingendem $\boldsymbol{D}$ ab. Es besteht die Beziehung

$$n_s = n_p + B\lambda_0 E_0^2$$

mit der elektrooptischen KERR-Konstanten $B$. Für Nitrobenzol ist bei 20 °C für $\lambda_0 = 546$ nm $B = 4{,}455 \cdot 10^{-12}\ \mathrm{V^{-2}\,m}$. Wie groß muß $E_0$ sein, um eine Differenz der Größe $10^{-4}$ zu erreichen?

A 3.2.14. Die **elektrooptische-Kerr-Zelle** besteht aus zwei Kondensatorplatten, zwischen denen sich Nitrobenzol befindet. An den Kondensator wird eine elektrische Spannung gelegt, die im Nitrobenzol ein starkes elektrisches Feld $\boldsymbol{E}_B$ aufbaut und damit den quadratischen KERR-Effekt hervorruft: Licht, dessen elektrischer Vektor $\boldsymbol{E}_{||}$ parallel zum äußeren Feld $\boldsymbol{E}_B$ schwingt, pflanzt sich schneller fort als Licht mit elektrischem Vektor $\boldsymbol{E}_\perp$ orthogonal zum angelegten Feld (vgl. Bild 3.2.7).
Zur Steuerung eines Lasers läßt man Licht durch einen Polarisator gehen, der so eingestellt ist, daß das durchgelassene Licht unter 45° gegen das angelegte Feld $\boldsymbol{E}_B$ schwingt. Die mit verschiedenen Geschwindigkeiten in der KERR-Zelle sich fortpflanzenden Komponenten $\boldsymbol{E}_{||}$ und $\boldsymbol{E}_\perp$ sind daher gleich groß. Im Anschluß an die KERR-Zelle trifft das Licht auf einen Planspiegel, der es senkrecht zurückwirft und erneut durch die KERR-Zelle gehen läßt.
Welche elektrische Feldstärke ist erforderlich, damit bei einer Länge der KERR-Zelle von $l = 2$ cm das zurückgeworfene Licht genau in der Sperrichtung des Polarisators schwingt und von diesem aus dem Strahlengang entfernt wird?

A 3.2.15. Der **Babinetsche Kompensator** (vgl. Bild 3.2.8) besteht aus zwei verschiedenen Keilen I und II mit dem gleichen spitzen Winkel. Hierdurch entsteht eine planparallele Platte mit veränderlicher Dicke. Das Material ist einachsig doppelbrechend. Die optische Achse des einen Keils liegt parallel, die des anderen senkrecht zur Kante. Der zu untersuchende Strahl fällt senkrecht auf die Platte. Er kennzeichne die $z$-Achse. Die Kante habe die Richtung der $x$-Achse. Bestim-

men Sie die Phasendifferenz $\delta_1' - \delta_2'$ zwischen der parallel und der orthogonal zur Kante schwingenden Komponente von $\boldsymbol{D}$, wenn die einfallende Welle durch

$$D_x = D_1 \cos(\omega t + \delta_1), \qquad D_y = D_2 \cos(\omega t + \delta_2)$$

gegeben ist und in I die optische Achse parallel zur Kante liegt.

A 3.2.16. Zur Messung der Polarisation des einfallenden Lichtes werde ein BABINETscher Kompensator aus Quarz verwendet. Schaltet man vor den Kompensator in den Strahlengang ein Nicol, so erhält man ein System von hellen und dunklen Streifen. Deren Abstand voneinander betrage $a = 0{,}550$ mm. Wird das polarisierende Nicol entfernt, so stellt man eine Verschiebung der Streifensysteme um $\Delta a = 0{,}075$ mm fest. Der Analysator ist dabei gegen die Kantenrichtung um $\Delta\varphi = 35°$ zu verdrehen. Berechnen Sie daraus die Polarisation des einfallenden Lichtes.

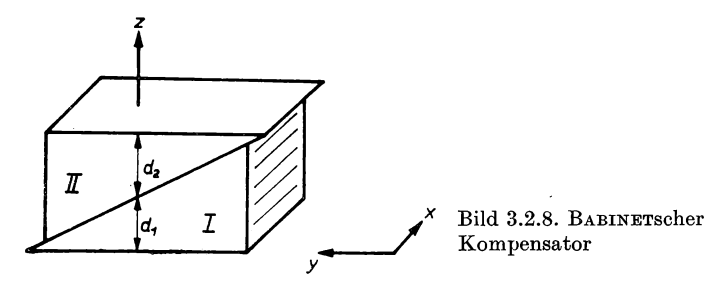



Bild 3.2.8. BABINETscher Kompensator

## 3.3. Drehung der Schwingungsrichtung durch optisch aktive Medien und durch Magnetfelder

### E Einführung

*Gyrationstensor*

In optisch aktiven Medien hängen die Polarisation $\boldsymbol{P}$ und damit die elektrische Erregung $\boldsymbol{D}$ nicht nur von der elektrischen Feldstärke $\boldsymbol{E}$ im betrachteten Punkt, sondern auch von der Umgebung, d. h. von der räumlichen Veränderung von $\boldsymbol{E}$ ab. $\boldsymbol{D}$ muß gegenüber einer Drehung des Koordinatensystems invariant sein. Bei Spiegelungen darf lediglich das Vorzeichen geändert werden. Diese Forderungen werden durch einen Ansatz der Form

$$\boldsymbol{D} = \varepsilon \boldsymbol{E} + f \operatorname{rot} \boldsymbol{E} \tag{1}$$

erfüllt.

Für ebene Lichtwellen folgt nach (1.3.1./13) und auf Grund der Orthogonalität von $\boldsymbol{E}$ und $\boldsymbol{H}$

$$\boldsymbol{B} = \sqrt{\varepsilon_0 \mu_0}\, n\boldsymbol{s} \times \boldsymbol{E}, \tag{2}$$

wobei $\boldsymbol{s}$ den Einheitsvektor in Strahlrichtung kennzeichnet. Andererseits besteht nach (1.3./8) die Beziehung

$$\dot{\boldsymbol{B}} = \mathrm{i}\omega \boldsymbol{B} = -\operatorname{rot} \boldsymbol{E}, \tag{3}$$

so daß sich aus (1)

$$\boldsymbol{D} = \varepsilon \boldsymbol{E} - \mathrm{i}\sqrt{\varepsilon_0\mu_0}\,\omega n \boldsymbol{f s} \times \boldsymbol{E}$$

ergibt.

Die Vektorgröße

$$\boldsymbol{G} = -\sqrt{\varepsilon_0\mu_0}\,\omega n \boldsymbol{f s} \tag{4}$$

wird als **Gyrationsvektor** bezeichnet. Sie ist im allgemeinen ortsabhängig. Für ein zunächst zugrunde gelegtes Cartesisches Koordinatensystem mit den Variablen $\xi$, $\eta$, $\zeta$ gilt daher

$$\boldsymbol{G} = \boldsymbol{G}(\xi, \eta, \zeta).$$

Zwischen der elektrischen Feldstärke $\boldsymbol{E}$ und der elektrischen Flußdichte $\boldsymbol{D}$ besteht bei optisch aktiven Medien somit die Beziehung

$$\boldsymbol{D} = \boldsymbol{\varepsilon}_{\text{symm}}\boldsymbol{E} + \mathrm{i}\boldsymbol{G} \times \boldsymbol{E}. \tag{5}$$

Wie man sich durch Ausmultiplizieren überzeugt, kann die vektorielle Multiplikation mit $\boldsymbol{G}$ stets durch eine skalare Multiplikation mit dem antimetrischen Tensor

$$\boldsymbol{\varepsilon}_{\text{anti}} = \begin{pmatrix} 0 & -G_\zeta & G_\eta \\ G_\zeta & 0 & -G_\xi \\ -G_\eta & G_\xi & 0 \end{pmatrix} \tag{6}$$

ersetzt werden. $\boldsymbol{\varepsilon}_{\text{anti}}$ heißt der **Gyrationstensor.**

Wird die Richtung des Gyrationsvektors $\boldsymbol{G}$ als $z$-Achse gewählt, so ergibt sich aus (2) und (3) wegen $G_\xi = G_\eta = 0$, $G_\zeta = G_z = G$

$$\boldsymbol{\varepsilon}_{\text{anti}} = \begin{pmatrix} 0 & -G & 0 \\ G & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}. \tag{7}$$

Bei einem anisotropen aktiven Medium, dessen Gyrationsvektor bzw. Drehachse mit einer Hauptachse zusammenfällt, erhält man, wenn die Drehachse als $z$-Achse gewählt wird, für den Dielektrizitätstensor

$$\boldsymbol{\varepsilon} = \boldsymbol{\varepsilon}_{\text{symm}} + \mathrm{i}\boldsymbol{\varepsilon}_{\text{anti}} = \begin{pmatrix} \varepsilon_x & -\mathrm{i}G & 0 \\ \mathrm{i}G & \varepsilon_y & 0 \\ 0 & 0 & \varepsilon_z \end{pmatrix}. \tag{8}$$

Aufgelöst nach den Komponenten, folgt aus (5) und (8)

$$\left.\begin{aligned} D_x &= \varepsilon_x E_x - \mathrm{i}G E_y, \\ D_y &= \mathrm{i}G E_y + \varepsilon_y E_y, \\ D_z &= \varepsilon_z E_z. \end{aligned}\right\} \tag{9}$$

*Gesetz der Brechungsindizes*

Die MAXWELLschen Gleichungen für ein strom- und ladungsfreies, aktives, anisotropes Medium lauten nach (1.3./7) bis (1.3./10) für periodische Felder mit einer Zeitabhängigkeit der Form $e^{i\omega t}$

$$i\omega\varepsilon\boldsymbol{E} = \operatorname{rot}\boldsymbol{H}, \tag{10}$$

$$-i\omega\mu_0\boldsymbol{H} = \operatorname{rot}\boldsymbol{E}, \tag{11}$$

$$\operatorname{div}\varepsilon\boldsymbol{E} = 0, \tag{12}$$

$$\operatorname{div}\mu_0\boldsymbol{H} = 0. \tag{13}$$

Multipliziert man die erste dieser Gleichungen mit $i\mu_0\omega$, während auf die zweite die Vektoroperation rot angewandt wird, ergibt sich durch Vergleich

$$\varepsilon\mu_0\omega^2\boldsymbol{E} = \operatorname{rot}\operatorname{rot}\boldsymbol{E}. \tag{14}$$

Die Vektoroperation rot rot kann durch $-\triangle +$ grad div ersetzt werden, wobei $\triangle$ den LAPLACE-Operator bedeutet. Setzt man einen optisch einachsigen Kristall voraus und nimmt an, daß die $z$-Achse mit der Drehachse zusammenfällt, so ist

$$\varepsilon_{\mathrm{I}} = \varepsilon_{\mathrm{II}} = \varepsilon_{\mathrm{s}}, \qquad \varepsilon_{\mathrm{III}} = \varepsilon_{\mathrm{p}}. \tag{15}$$

Damit folgt aus (14)

$$\mu_0\omega^2(\varepsilon_0 E_x - iGE_y) = -E_x + \operatorname{grad}_x \operatorname{div}\boldsymbol{E}, \tag{16}$$

$$\mu_0\omega^2(iGE_x + \varepsilon_0 E_y) = -E_y + \operatorname{grad}_y \operatorname{div}\boldsymbol{E}, \tag{17}$$

$$\mu_0\omega^2\varepsilon_{\mathrm{p}}E_z = -E_z + \operatorname{grad}_z \operatorname{div}\boldsymbol{E}. \tag{18}$$

Für die ebene Lichtwelle

$$\boldsymbol{E} = \boldsymbol{E}_0\, e^{i[\omega t - k_0 n(x\cos\alpha + y\cos\beta + z\cos\gamma)]} \tag{19}$$

mit $k_0 = \sqrt{\varepsilon_0\mu_0}\,\omega$ gehen die Gleichungen (16) bis (18) über in

$$D_x = \varepsilon_{\mathrm{s}}E_x - iGE_y = n^2\varepsilon_0[E_x - \cos\alpha(E_x\cos\alpha + E_y\cos\beta + E_z\cos\gamma)], \tag{20}$$

$$D_y = iGE_x + \varepsilon_{\mathrm{s}}E_y = n^2\varepsilon_0[E_y - \cos\beta(E_x\cos\alpha + E_y\cos\beta + E_z\cos\gamma)], \tag{21}$$

$$D_z = \varepsilon_{\mathrm{p}}E_z = n^2\varepsilon_0[E_x - \cos\gamma(E_x\cos\alpha + E_y\cos\beta + E_z\cos\gamma)]. \tag{22}$$

(20) bis (22) stellen ein homogenes Gleichungssystem zur Bestimmung des Verhältnisses $E_x : E_y : E_z$ der Feldkomponenten dar. Damit dieses Gleichungssystem lösbar ist, muß seine Koeffizientendeterminante verschwinden. Setzt man

$$n_{\mathrm{s}} = \sqrt{\frac{\varepsilon_{\mathrm{s}}}{\varepsilon_0}}, \qquad n_{\mathrm{p}} = \sqrt{\frac{\varepsilon_{\mathrm{p}}}{\varepsilon_0}}, \qquad g = \frac{G}{\varepsilon_{\mathrm{s}}}, \tag{23}$$

so erhält man

$$\begin{aligned}&[n_s^2 \sin^2 \gamma + n_p^2 \cos^2 \gamma]\, n^4\\ &- [n_s^4(1 - g^2) \sin^2 \gamma + n_s^2 n_p^2 (1 + \cos^2 \gamma)]\, n^2\\ &+ n_s^4 n_p^2 (1 - g^2) = 0.\end{aligned} \tag{24}$$

Darin heißt $g$ die **gyrotrope Konstante.**

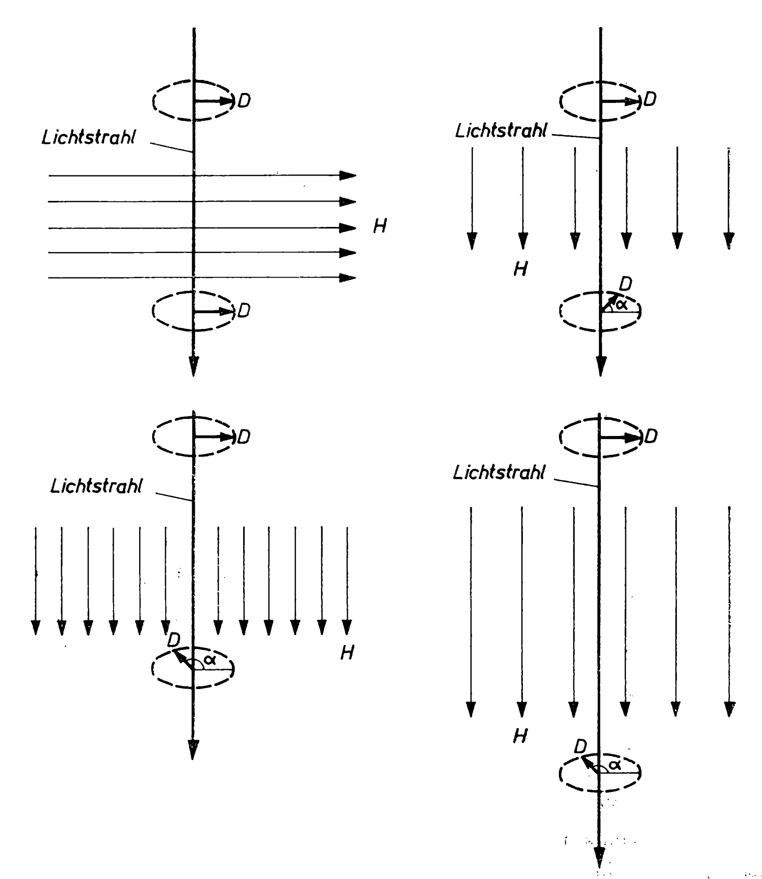



Bild 3.3.1. FARADAY-Effekt für verschiedene Richtungen und verschiedene Stärke des äußeren Magnetfeldes $\boldsymbol{H}$ (Der Drehwinkel $\theta$ ist hier mit $\alpha$ bezeichnet.)

Gleichung (24) wird als **Gesetz der Brechungsindizes** bezeichnet. Es legt die Brechzahl $n$ für eine vorgegebene Richtung der ebenen Welle (19) fest. Als biquadratische Gleichung besitzt (24) stets zwei positive Wurzeln. Zu jeder vorgegebenen Richtung gibt es daher zwei Brechzahlen $n_1$ und $n_2$ sowie zwei Phasengeschwindigkeiten $u_1$ und $u_2$.

*Magneto-optische Grundeffekte*

Unter dem Einfluß eines starken äußeren magnetischen Feldes wird die Schwingungsrichtung der elektrischen Erregung $\boldsymbol{D}$ einer linear polarisierten Lichtwelle gedreht (vgl. Bild 3.3.1). Das Magnetfeld wirkt wie ein aktives Medium.
Die Größe dieser Drehung $\theta$ ist proportional der Feldkomponente $\boldsymbol{H}_0$ in Richtung des Strahles, der Länge $l$ des Strahlweges im Magnetfeld und einer Stoffkonstanten $V$:

$$\theta = VH_0l. \tag{25}$$

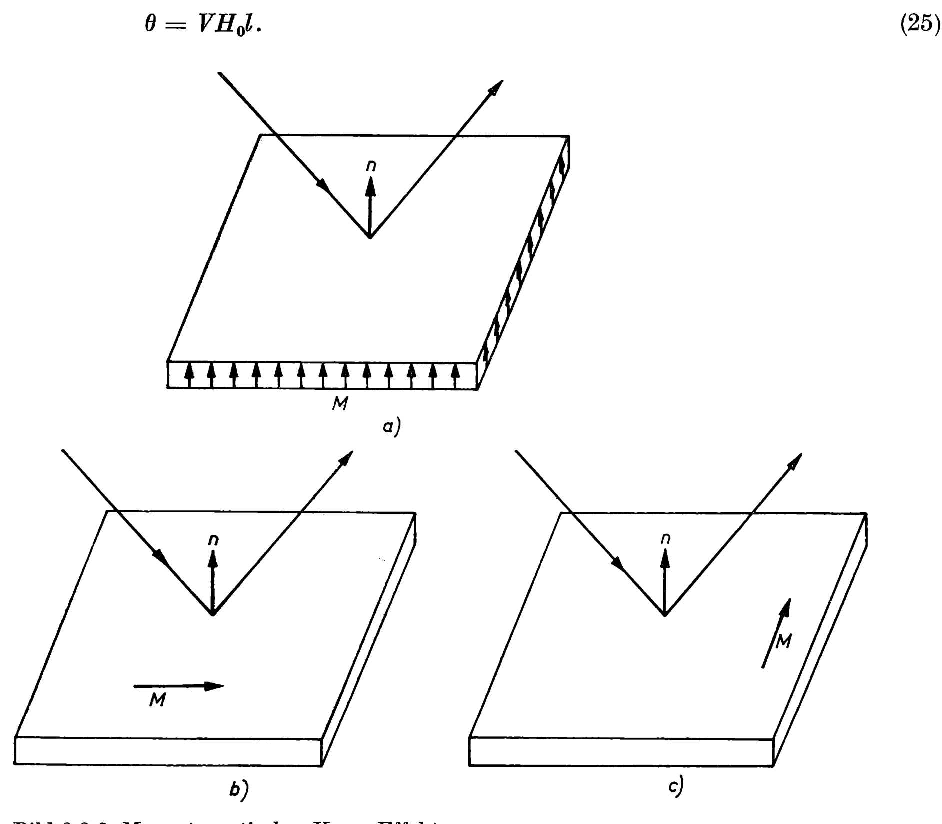



Bild 3.3.2. Magneto-optischer KERR-Effekt
a) polarer, b) longitudinaler, c) transversaler

(25) wird als **Faraday-Verdetsches Gesetz** bezeichnet. $V$ heißt VERDETsche Konstante. In Tab. 3.3.1 sind VERDETsche Konstanten $V$ für verschiedene Materialien zusammengestellt.
Bei ferro- und ferrimagnetischen Materialien, z. B. bei Eisen oder den ferrimagnetischen Granaten wie Gadolinium-Eisen-Granat $Gd_3Fe_5O_{12}$, wird das Magnetfeld durch die Magnetisierung des Materials erzeugt. Diese ist im allgemeinen nicht proportional der äußeren Feldstärke. Die Drehung der Schwingungsrichtung bei Sättigungsma-

gnetisierung $\boldsymbol{M}$ wird durch das KUNDTsche Gesetz

$$\theta = Fl = KMl \tag{26}$$

gegeben, wobei $F$ und $K$ Konstanten bedeuten (vgl. Tab. 3.3.2).
Bei der **Reflexion** an einem magnetisierten Medium wird linear polarisiertes Licht in elliptisch polarisiertes umgewandelt. Schwingt der elektrische Vektor des einfallenden Lichtes parallel zur Einfallsebene, so hat das reflektierte Licht eine zusätzliche, orthogonal zur Einfallsebene schwingende Komponente. Diese Erscheinung wird als der **magneto-optische Kerr-Effekt** bezeichnet.
Folgende Spezialfälle werden unterschieden (vgl. Bild 3.3.2):

a) polarer KERR-Effekt, $\boldsymbol{M}$ senkrecht zur Trennebene,
b) longitudinaler KERR-Effekt, $\boldsymbol{M}$ parallel zur Trennebene und zur Einfallsebene,
c) transversaler KERR-Effekt, $\boldsymbol{M}$ parallel zur Trennebene und orthogonal zur Einfallsebene.



## Probleme

### 3.3.1. Gyrotrope Konstante einer optisch aktiven Flüssigkeit

Linear polarisiertes Licht falle senkrecht auf die Oberfläche einer optisch aktiven Flüssigkeit. Untersuchen Sie das elektromagnetische Feld. Die optische Achse sei mit der Drehachse identisch. d-Campher in Alkohol hat das spezifische Drehvermögen $\tilde{\alpha} = 44{,}26°$, d. h., eine Konzentration von 100 g d-Campher in 1 l Lösung erzeugt beim Durchgang der D-Linie ($\lambda = 589$ nm, vgl. 5.2.) durch eine 1 m dicke Flüssigkeitsschicht eine Drehung der Schwingungsrichtung um $\theta = 44{,}26°$ nach rechts (bei 20 °C).
Bestimmen Sie die gyrotrope Konstante. Die Absorption werde vernachlässigt.

**Lösung:**

Lichtstrahl und optische Achse seien identisch mit der $z$-Achse. Es ist also $\cos\alpha = \cos\beta = 0$. Im Gesetz (3.3./24) der Brechungsindizes hebt sich $n_p^2$ heraus, womit sich

$$n^4 - 2n_s^2n^2 + n_s^4(1 - g^2) = 0 \tag{1}$$

ergibt. Diese Gleichung hat die Lösungen

$$n_+^2 = n_s^2(1 - g), \qquad n_-^2 = n_s^2(1 + g). \tag{2}$$

Wir können $g \ll 1$ voraussetzen, so daß anstelle von (2)

$$n_+ = n_s\left(1 - \frac{g}{2}\right), \qquad n_- = n_s\left(1 + \frac{g}{2}\right) \tag{3}$$

geschrieben werden kann. Negative Werte für die Brechzahl sind physikalisch ohne Bedeutung. Nach (3.3./20) und (3.3./21) folgt

$$D_x = \varepsilon_0 n_s^2(E_x - \mathrm{i}gE_y), \tag{4}$$

$$D_y = \varepsilon_0 n_s^2(\mathrm{i}gE_x + E_y), \tag{5}$$

$$D_z = \varepsilon_0 n_p^2 E_z. \tag{6}$$

Wegen der Transversalität der Welle ist $D_z = 0$.

Aus (4) und (5) bilden wir die Linearkombinationen

$$D_+ = D_x + \mathrm{i}D_y = \varepsilon_0 n_+^2(E_x + \mathrm{i}E_y), \tag{7a}$$

$$D_- = D_x - \mathrm{i}D_y = \varepsilon_0 n_-^2(E_x - \mathrm{i}E_y). \tag{7b}$$

In diesen drücken sich die Komponenten $D_x$ und $D_y$ wie folgt aus:

$$D_x = \frac{1}{2}(D_+ + D_-), \qquad D_y = -\frac{\mathrm{i}}{2}(D_+ - D_-). \tag{8}$$

Die in Richtung der $z$-Achse fortschreitende elektromagnetische Welle

$$\boldsymbol{D} = \boldsymbol{D}_0\, \mathrm{e}^{\mathrm{i}(\omega t - k_0 n z)} \tag{9}$$

kann aus den beiden Teilwellen

$$\boldsymbol{D}_+ \neq 0, \quad \boldsymbol{D}_- = 0 \quad \text{und} \quad \boldsymbol{D}_- \neq 0, \quad \boldsymbol{D}_+ = \boldsymbol{0}$$

zusammengesetzt werden.
Für die Welle $\boldsymbol{D}_+ \neq 0$, $\boldsymbol{D}_- = 0$ ist nach (7b) bzw. (8)

$$\left(\frac{D_x}{D_y}\right)_+ = \mathrm{i} = \frac{\mathrm{e}^{\mathrm{i}\left(\omega t + \frac{\pi}{2}\right)}}{\mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega t}}. \tag{10}$$

Aus der Verknüpfung zwischen $\boldsymbol{D}$ und $\boldsymbol{E}$ nach (7a) folgt $n = n_+$. Wegen der zeitlichen Abhängigkeit $\mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega t}$ stellt $\boldsymbol{D}_+$ eine linksdrehend zirkular polarisierte Welle dar, d. h., in Ausbreitungsrichtung blickend, erfolgt die Rotation von $\boldsymbol{D}_+$ im mathematischen Drehsinn. Dagegen ergibt sich für $\boldsymbol{D}_+ = 0$, $\boldsymbol{D}_- \neq 0$ aus (8) bzw. (7a)

$$\left(\frac{D_x}{D_y}\right) = -\mathrm{i} \tag{11}$$

und damit für $D_-$ eine rechtsdrehend zirkular polarisierte Welle. Für die Brechzahl folgt daraus $n = n_-$.
Bei linear polarisiert einfallenden Wellen kann die Schwingungsrichtung an der durch $z = 0$ gekennzeichneten Eintrittsstelle in das aktive Medium als $x$-Achse gewählt werden. Hier ist daher

$$D_x = D_+ = D_- = D_0\, \mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega t}, \qquad D_y = 0. \tag{12}$$

Nach Durchlaufen der Schichtdicke $l$ sind die Komponenten nach (9)

$$D_+(l) = D_0\, \mathrm{e}^{-\mathrm{i}k_0 n_+ l}\, \mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega t}, \tag{13}$$

$$D_-(l) = D_0\, \mathrm{e}^{-\mathrm{i}k_0 n_- l}\, \mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega t}. \tag{14}$$

Damit folgt aus (8) in Verbindung mit (3)

$$D_x = D_0\, \mathrm{e}^{-\mathrm{i}k_0 n_s l} \cos\frac{k_0 g l}{2}\, \mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega t}, \tag{15}$$

$$D_y = D_0\, \mathrm{e}^{-\mathrm{i}k_0 n_s l} \sin\frac{k_0 g l}{2}\, \mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega t}. \tag{16}$$

Die Schwingung bleibt danach stets linear polarisiert. Sie ist jedoch, gemessen im mathematischen Drehsinn, um den Winkel

$$\theta = \frac{k_0 g l}{2} = \frac{\pi l}{\lambda_0}\, \frac{n_+ - n_-}{n_s} \tag{17}$$

gedreht worden (vgl. Bild 3.3.1).

Für die gesuchte gyrotrope Konstante $g$ erhält man daraus

$$g = \frac{2\theta}{k_0 l} = \frac{\theta \lambda_0}{\pi l}. \tag{18}$$

Mit den vorgegebenen Werten folgt bei Umrechnung von Winkelgrad in Radiant (Bogeneinheiten)

$$g = \frac{44{,}26^\circ \cdot 589 \cdot 10^{-9}\ \mathrm{m}}{180^\circ \cdot 1\ \mathrm{m}} = 1{,}45 \cdot 10^{-7}.$$

### 3.3.2. Faraday-Effekt

Es liege optisch einachsiges Material vor. Der Strahl habe die Richtung der Symmetrieachse. Leiten Sie die Verknüpfung der VERDETschen Konstanten $V$ mit der gyrotropen Konstanten $g$ her. Wie groß ist diese für Europiumdifluorid $EuF_2$ bei $\lambda = 450$ nm und $T = 293$ K, wenn für die VERDETsche Konstante $V = 2 \cdot 10^{-3}$ rad $A^{-1}$ angegeben wird? Die magnetische Feldstärke betrage 10 kA $m^{-1}$.
Welche Feldstärke ist aufzuwenden, wenn für $l = 1$ mm eine Drehung um 180° beobachtet werden soll? Wie groß ist dabei die Intensität der durchgehenden Welle? Der Absorptionskoeffizient hat den Wert $\beta = 1250\ \mathrm{m}^{-1}$.

**Lösung:**

Aus dem FARADAY-VERDETschen Gesetz (3.3./25) folgt in Verbindung mit (3.3.1./18) für die Verknüpfung zwischen der VERDETschen und der gyrotropen Konstanten

$$g = \frac{V H_0 \lambda}{\pi}. \tag{1}$$

Mit den vorgegebenen Werten erhält man

$$g = \frac{2 \cdot 10^{-3} \cdot 10^4 \cdot 450 \cdot 10^{-9}}{\pi} = 2{,}86 \cdot 10^{-6}.$$

$\theta = \pi$ erfordert nach (1) für $l = 10^{-3}$ m die Feldstärke

$$H_0 = \frac{\theta}{Vl} = \frac{\pi}{2 \cdot 10^{-3} \cdot 10^{-3}} = 1{,}57 \cdot 10^6\ \mathrm{A\ m^{-1}}.$$

Die Intensität klingt dabei auf den Anteil

$$\frac{|D|^2}{|D_0|^2} = e^{-2\beta l} = e^{-2 \cdot 1{,}25 \cdot 10^3 \cdot 10^{-3}} = e^{-2{,}5} = 0{,}082$$

ab.

### 3.3.3. Optimale Schichtdicke und Wirkungsgrad bei der Speicherwiedergabe durch den Faraday-Effekt

Bei der Informationsspeicherung können in einer Speicherzelle die beiden Informationen O und L aufgezeichnet werden. Der Unterschied besteht in der entgegengerichteten Sättigungsmagnetisierung $+M$ oder $-M$ der Speicherzelle einer magnetischen Schicht. Bei der Speicherwiedergabe werde der FARADAY-Effekt gemäß Bild 3.3.3 ausgenutzt: Die Schicht wird bei der Speicherzelle mit linear polarisiertem Licht durchstrahlt und die Drehung der Schwingungs-

richtung auf Grund von Intensitätsunterschieden nach Durchgang durch den Analysator nachgewiesen. Dabei ist zu berücksichtigen, daß jede Schicht das Licht absorbiert, und zwar um so stärker, je dicker die Schicht ist. Andererseits ist die Drehung der Schwingungsrichtung ebenfalls der Schichtdicke proportional. Untersuchen Sie, für welche Schichtdicke $l_{\text{opt}}$ der Intensitätsunterschied im Analysator den größten Wert annehmen kann. Als Speichermedium werde MnBi mit den Daten nach Tab. 3.3.2 verwendet.

**Lösung:**

Es sei in der Speicherschicht die Information O gespeichert. Der Analysator sei so eingestellt, daß das durchgehende Licht vollständig ausgelöscht, also nur die Rauschintensität gemessen wird:

$$D(\mathrm{O}) = 0, \quad DD^* = |D|^2 = 0. \tag{1}$$

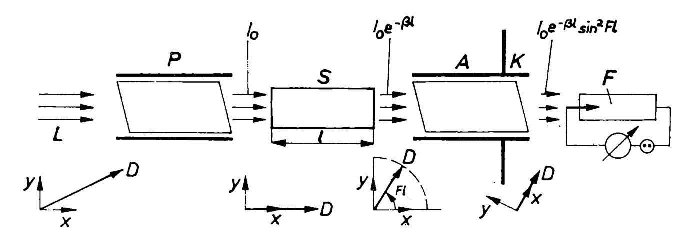



Bild 3.3.3. Messung der FARADAY-Drehung

L linear polarisiertes Licht, P Polarisator, S optisch aktive Substanz, A drehbarer Analysator, K Kreisteilung, F Fotodiode mit Fotometer

Nach der mit der Aufzeichnung von L verbundenen Ummagnetisierung wird die Schwingungsrichtung des durchgehenden Lichtes gegenüber dem Ausgangszustand um den Winkel

$$2\theta = 2Fl \tag{2}$$

verdreht. Wir erhalten daher gemäß (3.3.1./16) und (3.3.1./17) unter Berücksichtigung der Absorption

$$D(\mathrm{L}) = D_0 \, e^{-\beta l} \, e^{-2ik_0 n_s l} \sin 2Fl \, e^{i\omega t} \tag{3}$$

und für die Intensität der durchgehenden Welle

$$DD^*(\mathrm{L}) = D_0^2 \, e^{-2\beta l} \sin^2 2Fl. \tag{4}$$

Darin bezeichnet $D_0$ die elektrische Erregung beim Eintritt in die Schicht.
Soll die Schicht optimal ausgenutzt werden, so muß $DD^*$ ein Maximum annehmen:

$$\frac{\mathrm{d}DD^*}{\mathrm{d}l} = 0 \quad \text{bzw.} \quad \frac{\tan 2Fl_{\text{opt}}}{2F} = \frac{1}{\beta}. \tag{5}$$

Wir nehmen für $2Fl$ Werte in der Größenordnung bis zu einigen Grad an und können daher genähert $\tan 2Fl$ durch $2Fl$ ersetzen. Damit folgt für die **optimale Schichtdicke**

$$l_{\text{opt}} = \frac{1}{\beta}. \tag{6}$$

Durch Einsetzen in (4) ergibt sich für den **Wirkungsgrad**

$$\frac{DD^*}{D_0^2} = e^{-2} \sin^2 \frac{2F}{\beta}. \tag{7}$$

Mit den vorgegebenen Werten erhalten wir

$$l_{\mathrm{opt}} = \frac{1}{1{,}7 \cdot 10^7}\ \mathrm{m} = 59\ \mathrm{nm},$$

$$\frac{DD^*}{D_0^2} = 0{,}135 \cdot \sin^2 \frac{2 \cdot 140 \cdot 10^5}{1{,}7 \cdot 10^7} = 0{,}134.$$

### 3.3.4. Cotton-Mouton-Effekt

Linear polarisiertes Licht werde durch flüssigen Schwefelkohlenstoff geleitet. Auf diesen wirke ein Magnetfeld $\boldsymbol{H}_0$, das senkrecht zum Lichtstrahl gerichtet ist. Der flüssige Schwefelkohlenstoff befinde sich zwischen zwei NICOLschen Prismen (vgl. Bild 3.3.3). Sie seien derart eingestellt, daß sie bei ausgeschaltetem Magnetfeld $\boldsymbol{H}_0$ gekreuzt sind, das Gesichtsfeld dann also dunkel ist. Nach Einschalten von $\boldsymbol{H}_0$ wird eine Aufhellung beobachtet, die nicht durch Drehung des Analysators, sondern nur durch Zwischenschaltung eines Kompensators zu beseitigen ist. Hiernach wird für die Wellenlänge $\lambda_0 = 580$ nm bei einer 10 cm ($l$) dicken Schicht Schwefelkohlenstoff für $H_0 = 1{,}5 \cdot 10^6\ \mathrm{A\ m^{-1}}$ zwischen der senkrecht und der parallel zum Feld $\boldsymbol{H}_0$ schwingenden Komponente von $D$ eine Phasenverschiebung $\Delta\varphi = -0{,}09$ rad $= -5{,}1°$ festgestellt. Die VERDETsche Konstante ist $V = 1{,}6 \cdot 10^{-5}\ \mathrm{rad\ A^{-1}}$. Bestimmen Sie danach die Abhängigkeit der Brechzahl vom Magnetfeld $\boldsymbol{H}_0$. Bei ausgeschaltetem Magnetfeld ist $n = 1{,}63$.

**Lösung:**

Die Richtung des Strahles kennzeichne die $x$-Achse, die des Magnetfeldes $\boldsymbol{H}_0$ die $z$-A chse Wegen der Orthogonalität der elektromagnetischen Welle ist $D_x = 0$. Damit folgt aus (3.3./20) in Verbindung mit (3.3./23)

$$E_x = \mathrm{i} g E_y. \tag{1}$$

Nach (3.3./21) und (3.3./23) erhält man

$$D_y = \varepsilon_0 n_{\mathrm{s}}^2 (1 - g^2)\, E_y, \tag{2}$$

während sich aus (3.3./22) im Zusammenhang mit (3.3./23)

$$D_z = \varepsilon_0 n_{\mathrm{p}}^2 E_z \tag{3}$$

ergibt.

Die elektromagnetische Welle kann somit in zwei zueinander senkrecht polarisierte Teilwellen zerlegt werden. Für die erste ist

$$D_y = \varepsilon_0 n_y^2 E_y, \quad D_z = 0 \tag{4}$$

mit

$$n_y = n_{\mathrm{s}} \sqrt{1 - g^2}, \tag{4a}$$

für die zweite

$$D_y = 0, \qquad D_z = \varepsilon_0 n_z^2 E_z \tag{5}$$

mit

$$n_z = n_{\mathrm{p}}. \tag{5a}$$

Als Phasendifferenz nach Durchstrahlung eines Medium der Dicke $l$ erhält man daraus

$$\Delta\varphi = \varphi_y - \varphi_z = \frac{2\pi l}{\lambda_0} \left(n_{\mathrm{s}} \sqrt{1 - g^2} - n_{\mathrm{p}}\right). \tag{6}$$

Um die Abhängigkeit der Dielektrizitätskonstanten vom Magnetfeld $\boldsymbol{H}_0$ zu bestimmen, schreiben wir

$$\varepsilon(H_0) = \varepsilon(0) + \left(\frac{\partial \varepsilon}{\partial H_0}\right)_{H_0=0} H_0 + \frac{1}{2}\left(\frac{\partial^2 \varepsilon}{\partial H_0^2}\right)_{H_0=0} H_0^2 + \cdots. \tag{7}$$

Bei Umkehr der Feldrichtung folgt

$$\varepsilon(-H_0) = \varepsilon(0) - \left(\frac{\partial \varepsilon}{\partial H_0}\right)_{H_0=0} H_0 + \frac{1}{2}\left(\frac{\partial^2 \varepsilon}{\partial H_0^2}\right)_{H_0=0} H_0^2 + \cdots. \tag{8}$$

Die Dielektrizitätskonstante muß unabhängig davon sein, in welcher Richtung das Feld angelegt wird. Insbesondere muß

$$\varepsilon(H_0) = \varepsilon(-H_0) \tag{9}$$

gelten. Daraus erhält man

$$\left(\frac{\partial \varepsilon}{\partial H_0}\right)_{H_0=0} = 0 \tag{10}$$

und weiter

$$\varepsilon(H_0) = \varepsilon(0) + \frac{1}{2}\left(\frac{\partial^2 \varepsilon}{\partial H_0^2}\right)_{H_0=0} H_0^2. \tag{11}$$

Da $\boldsymbol{H}_0$ die Richtung der $z$-Achse hat, kennzeichnet $\varepsilon_\mathrm{p}$ die Dielektrizitätskonstante ohne Feldwirkung, $\varepsilon_\mathrm{s}$ mit Feld. Für den infolge des angelegten Feldes auftretenden Unterschied zwischen $\varepsilon_\mathrm{s} = n_\mathrm{s}^2\varepsilon_0$ und $\varepsilon_\mathrm{p} = n_\mathrm{p}^2\varepsilon_0$ ergibt sich somit nur ein Glied zweiter Größenordnung. Das gleiche gilt für die Differenz der Brechzahlen

$$n_\mathrm{s} - n_\mathrm{p} = \alpha H_0^2 \qquad \text{mit} \qquad \alpha = \frac{1}{4\varepsilon_0 n_\mathrm{p}}\left(\frac{\partial^2 \varepsilon}{\partial H_0^2}\right)_{H_0=0}. \tag{12}$$

Nach (3.3./25) und (3.3.1./18) ist

$$g = \frac{V\lambda_0}{\pi} H_0. \tag{13}$$

Setzt man (12) und (13) in (6) ein, so folgt für die Phasendifferenz zwischen den beiden Teilwellen nach Durchlaufen der Strecke $l$

$$\Delta\varphi = \varphi_y - \varphi_z = ClH_0^2 \tag{14}$$

mit der Cotton-Mouton-Konstanten

$$C = \frac{2\pi}{\lambda_0}\left(\alpha - \frac{n_\mathrm{p}}{2}\frac{V^2\lambda_0^2}{\pi^2}\right). \tag{15}$$

Tab. 3.3.4 enthält Werte für $C$.
Mit den vorgegebenen Zahlen erhält man aus (14) durch Auflösen nach $C$

$$C = \frac{-0{,}090}{0{,}10 \cdot (1{,}5 \cdot 10^6)^2}\ \mathrm{A^{-2}\,m} = -4{,}0 \cdot 10^{-13}\ \mathrm{A^{-2}\,m}.$$

Wird (15) nach $\alpha$ aufgelöst, so folgt

$$\alpha = \left[-\frac{580 \cdot 10^{-9}}{2\pi} \cdot 4{,}0 \cdot 10^{-13} + \frac{1{,}63 \cdot (1{,}6 \cdot 10^{-5})^2 \cdot (580 \cdot 10^{-9})^2}{2\pi^2}\right] \mathrm{A^{-2}\,m^2}$$
$$= (-3{,}69 \cdot 10^{-20} + 7{,}1 \cdot 10^{-24})\ \mathrm{A^{-2}\,m^2}.$$

Die Veränderlichkeit der Brechzahl mit dem Magnetfeld trägt somit im vorliegenden Fall am stärksten zum COTTON-MOUTON-Effekt bei, während die gyrotropen Eigenschaften in den Hintergrund treten. Für die Abhängigkeit der Brechzahl vom Magnetfeld folgt nach (12)

$$n_s = n_p - 3{,}69 \cdot 10^{-20}\ \mathrm{A}^{-2}\ \mathrm{m}^2\ H_0^2.$$



## Aufgaben

A 3.3.1. In einer 25 cm dicken Lösungsschicht wird durch d-Weinsäuredimethylester bei 20 °C eine FARADAY-Drehung um 1,5° festgestellt. Wie groß ist die Konzentration der Lösung? Werte sind nach Tab. 3.3.3 einzusetzen.

A 3.3.2. Bestimmen Sie die optimale Schichtdicke und den Wirkungsgrad bei der Speicherwiedergabe mit Hilfe des FARADAY-Effektes für eine Eisenschicht (Werte nach Tab. 3.3.2).

A 3.3.3. Wie lauten die Komponenten der elektrischen Flußdichte $D$, bezogen auf die Hauptachsen, wenn die optische Drehachse nicht mit einer Hauptachse zusammenfällt?

A 3.3.4. Stellen Sie das Gesetz der Brechungsindizes für den allgemeinen Fall des optisch zweiachsigen Mediums auf, wenn die optische Drehachse beliebig im Raum liegt.

A 3.3.5. Drücken Sie das Gesetz der Brechungsindizes mit Hilfe der Wurzeln $n_{01}$, $n_{02}$ bei verschwindendem Gyrationsvektor aus.

A 3.3.6. Wie lauten die beiden Wurzeln $n_1$, $n_2$ des Gesetzes der Brechungsindizes für ein optisch aktives Medium, wenn die drei Hauptbrechzahlen gleich sind? Drücken Sie $n_1$ und $n_2$ durch $n_{01}$ und $n_{02}$ aus.

A 3.3.7. Berechnen Sie aus dem Gesetz der Brechungsindizes genähert die Brechzahlen $n_+$ und $n_-$ und die Ausfallswinkel $\gamma_+$ und $\gamma_-$ für eine unter dem Winkel $\varphi = 45°$ auf eine Eisenschicht fallende Welle. Die Eisenschicht sei orthogonal zu ihrer Oberfläche magnetisiert. Für die Brechzahl ist $n = 3{,}02$, für die gyrotrope Konstante $g = 0{,}044$, für die Wellenlänge des einfallenden Lichtes $\lambda = 616$ nm zu setzen.

A 3.3.8. Parallel polarisiertes Licht fällt auf eine Eisenschicht, die orthogonal zur Oberfläche magnetisiert ist. Stellen Sie die Formeln für das elektromagnetische Feld in der Eisenschicht auf. Drücken Sie die Komponenten des elektrischen Feldes $\boldsymbol{E}$ durch die elektrische Erregung $\boldsymbol{D}$ aus und bestimmen Sie das Verhältnis der parallel zur Einfallsebene gerichteten Komponente $D_p$ zur orthogonalen $D_s$. In der Eisenschicht ist auch ein orthogonaler Anteil des elektromagnetischen Feldes anzusetzen.

A 3.3.9. Eine Welle fällt parallel polarisiert auf eine orthogonal zu ihrer Oberfläche magnetisierte Eisenschicht. Bestimmen Sie das magnetische Feld in der Eisenschicht.

A 3.3.10. Stellen Sie zu A 3.3.9. die Formeln für das reflektierte elektromagnetische Feld auf. Auch bei der reflektierten Welle ist ein orthogonal polarisierter Anteil anzusetzen.

A 3.3.11. Die Übergangsbedingungen für das elektromagnetische Feld können im Falle eines magnetisierten bzw. eines optisch aktiven Mediums für eine parallel polarisiert einfallende Welle nur erfüllt werden, wenn sowohl beim reflektierten als auch beim gebrochenen Feld orthogonal polarisierte Anteile auftreten. Stellen Sie die Übergangsbedingungen auf, und berechenen Sie die Amplituden der reflektierten Welle für eine parallel polarisiert einfallende Welle. Das brechende Medium sei eine orthogonal zu ihrer Oberfläche magnetisierte Eisenschicht.

A 3.3.12. Berechnen Sie für eine unter dem Winkel $\varphi = 45°$ einfallende, parallel polarisierte Welle die Komponenten des reflektierten Feldes, wenn das brechende

Medium eine orthogonal zu ihrer Oberfläche magnetisierte Eisenschicht ist ($n = 3{,}02$, $g = 0{,}044$, $\lambda = 616$ nm).

A 3.3.13. Eine elektromagnetische Welle fällt beliebig polarisiert auf eine orthogonal zu ihrer Oberfläche magnetisierte Eisenschicht. Stellen Sie durch Verallgemeinerung von A 3.3.11. aus den Übergangsbedingungen eine Formel der Form

$$\begin{pmatrix} R_s \\ R_p \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} r_{11} & r_{12} \\ r_{21} & r_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} E_s \\ E_p \end{pmatrix}$$

für die Komponenten des reflektierten elektromagnetischen Feldes auf (allgemeiner Fall des **polaren Kerr-Effektes**).

A 3.3.14. Leiten Sie allgemein die Formel für die Amplituden des reflektierten Feldes beim **longitudinalen Kerr-Effekt** ab.

A 3.3.15. Stellen Sie die Formel für die Amplituden der reflektierten Welle beim **transversalen Kerr-Effekt** auf.

# 4. Interferenz und Beugung

## 4.1. Interferenz vieler Wellenzüge

### E Einführung

*Interferenz und Kohärenz*

Die MAXWELLschen Gleichungen stellen lineare, vektorielle Beziehungen zwischen elektrischen und magnetischen Feldgrößen dar. Dabei addieren sich die elektrischen und die magnetischen Größen mehrerer Felder vektoriell:

$$\boldsymbol{E} = \sum_i \boldsymbol{E}_i, \qquad \boldsymbol{H} = \sum_i \boldsymbol{H}_i. \tag{1}$$

Bei der Überlagerung elektromagnetischer Lichtwellen kommt der Unterschied zwischen den real auftretenden Wellen und den wegen ihrer einfachen mathematischen Handhabung nach 1.2. und 1.3. eingeführten räumlich und zeitlich unbegrenzten Wellen der Form

$$\boldsymbol{E} = \boldsymbol{E}_0 \, \mathrm{e}^{\mathrm{i}(\omega t - kz)} \tag{2}$$

zur Geltung.
Reale Wellen sind räumlich und zeitlich begrenzt. Ihre bei der Beobachtung auftretende Frequenz stellt einen Mittelwert dar, da sich ein begrenzter Wellenzug durch FOURIER-Entwicklung nach 1.4. darstellen läßt.
Als Interferenz zweier Wellen bezeichnet man ihr Verhalten, sich gegenseitig auszulöschen oder zu verstärken. Voraussetzung für die Interferenz zweier Wellen ist ihre **Kohärenz:** Sie müssen zueinander in einer bestimmten Phasenbeziehung stehen; die Phasendifferenzen zwischen beiden Wellen muß konstant sein oder sich gesetzmäßig ändern. Inkohärente Wellen, zwischen denen keine Phasenbeziehung besteht, interferieren nicht miteinander.
Die einzelnen Atome und Moleküle eines Körpers strahlen Lichtwellen nicht gleichmäßig, sondern unregelmäßig und willkürlich ab. Ideales kohärentes Licht entsteht daher aus dem Licht einer punktförmigen Lichtquelle bzw. eines Atoms oder Moleküls, indem dieses Licht durch Spiegelung, Brechung oder Ausblenden geteilt wird und die erzeugten Wellenzüge verschiedene Wege durchlaufen.

*Intensität interferierender Wellen*

Bei Intensitätsuntersuchungen ist die mittlere Energiestromdichte von Interesse. Nach (1.3./12) und (1.3.1./13) ist diese gleich

$$\boldsymbol{S} = \boldsymbol{E} \times \boldsymbol{H} = n \sqrt{\frac{\varepsilon_0}{\mu_0}}\, \overline{\boldsymbol{E}^2}. \tag{3}$$

Dabei sind nur die Realteile oder nur die Imaginärteile der Feldgrößen zu berücksichtigen. $n$ gibt die Brechzahl des Mediums an.
Eine monochromatische, linear polarisierte Welle habe die elektrische Feldstärke

$$E_1 = E_{10}\, e^{i(\omega t - kz + \delta_1)}, \tag{4}$$

eine zweite

$$E_2 = E_{20}\, e^{i(\omega t - kz + \delta_2)}. \tag{5}$$

Für Intensitätsvergleiche genügt es, die Größe

$$2\overline{(\mathrm{Re}\, E_i)^2} = 2E_{i0}^2\, \overline{\cos^2(\omega t - kz + \delta_i)} = E_{i0}^2 \qquad (i = 1, 2) \tag{6}$$

zu bestimmen. Hierfür erhält man

$$\boxed{2\overline{(\mathrm{Re}\, E_i)^2} = E_i E_i^*}, \tag{7}$$

wobei $E_i^*$ die konjugiert komplexe Größe von $E_i$ kennzeichnet. Im folgenden wird (7) als **Intensität der Welle** bezeichnet.
Kommen zwei Wellen zur Interferenz, so folgt

$$E = E_1 + E_2 = (E_{10}\, e^{i\delta_1} + E_{20}\, e^{i\delta_2})\, e^{i(\omega t - kz)}. \tag{8}$$

Für die Intensität erhält man

$$\begin{aligned} 2\overline{E^2} = EE^* &= (E_{10}\, e^{i\delta_1} + E_{20}\, e^{i\delta_2})\, (E_{10}\, e^{-i\delta_1} + E_{20}\, e^{-i\delta_{20}}) \\ &= E_{10}^2 + E_{20}^2 + 2E_{10}E_{20} \cos(\delta_1 - \delta_2). \end{aligned} \tag{9}$$

Interferenzen treten infolge des Faktors $\cos(\delta_1 - \delta_2)$ im dritten Summanden auf. Maximale Intensität wird für

$$\delta = \delta_1 - \delta_2 = \delta_{\max} = 2h\pi \qquad (h = 0, \pm 1, \pm 2, \ldots), \tag{10}$$

minimale für

$$\delta = \delta_1 - \delta_2 = \delta_{\min} = \pm(2h + 1)\,\pi \qquad (h = 0, \pm 1, \pm 2, \ldots) \tag{11}$$

angenommen.
Senkrecht zueinander schwingende Komponenten können nicht miteinander interferieren. Die abgeleiteten Formeln gelten daher für linear polarisiertes ebenso wie für elliptisch polarisiertes oder natürliches Licht.

*Kohärenzlänge*

Die maximale Wegdifferenz, die miteinander interferierende Strahlen haben können, heißt Kohärenzlänge.
Die Länge $\Delta l$ eines Wellenzuges ist primär durch die Dauer des Elementaraktes der Lichtemission gegeben. Nach (1.4.7./13) ergibt sich auf Grund der FOURIER-Entwicklung zwischen der Frequenzbreite $\Delta f$ einer Spektrallinie und der Dauer $\Delta t$ des Elementaraktes $\Delta f \, \Delta t \geqq 1$, woraus größenordnungsmäßig für die Länge des Wellenzuges bzw. die Kohärenzlänge

$$\Delta l = c \, \Delta t \approx \frac{c}{\Delta f} = \frac{\lambda^2}{\Delta \lambda} \tag{12}$$

folgt.
Die Emissionszeit eines Atoms liegt in der Größenordnung $10^{-8}$ s. Nach (12) entspricht das der Kohärenzlänge $\Delta l = 3$ m und der Frequenzbreite $\Delta f = 10^8$ Hz. Der Emissionsvorgang wird jedoch durch die thermische Bewegung des Atoms gestört. Hierdurch ergibt sich infolge des DOPPLER-Effektes eine Frequenzverschiebung, die zur Erhöhung der Frequenzbreite führt. Die Erhöhung der Frequenzbreite ist proportional $\sqrt{\frac{T}{A}}$, wobei $A$ die relative Atommasse und $T$ die absolute Temperatur kennzeichnen. Maximal erreicht $\Delta f$ wegen des DOPPLER-Effektes die Größenordnung $10^{11}$ Hz.
Stöße zwischen den Atomen führen zum vorzeitigen Abbrechnen des Emissionsvorganges und damit ebenfalls zur Linienverbreiterung. Sie erreicht in heißen Gasen oder Festkörpern die Größenordnung $10^{14}$ Hz.
Infolge dieser Einflüsse kann bei Licht von konventionellen Lichtquellen (Spektrallampen) nur mit einer Kohärenzlänge in der Größenordnung von Zentimetern gerechnet werden (vgl. Tab. 4.1.1).

*Kohärenzbedingung für ausgedehnte Strahler*

Die real verwendeten Lichtquellen weisen Abmessungen auf, die groß gegen ein Atom und gegen die Lichtwellenlänge sind. Der räumlich ausgedehnte Strahler läßt sich in Teilstrahler zerlegt denken, die unabhängig voneinander Licht aussenden. Die Oberfläche der realen Lichtquelle kann zumindest stückweise als eben vorausgesetzt werden.
Von jedem Punkt $P_i$ der ebenen Lichtquelle geht eine elektromagnetische Welle aus, die gegen die von den benachbarten Punkten ausgehenden Wellen durch ihre Phasenverschiebung

$$\delta_{0i} = \delta_{0i}(P_i) \tag{13}$$

gekennzeichnet ist. Gemäß (1) überlagern sich diese Wellen zur resultierenden Welle. Bei der Berechnung des resultierenden Schwingungszustandes in einem Raumpunkt $P$ des Strahlungsfeldes sind außer den unterschiedlichen Phasenverschiebungen $\delta_{0i}$ beim Ausgang der Wellen die Phasenänderungen bei der Fortpflanzung im Raum

$$\delta_i = k r_i = \frac{2\pi r_i}{\lambda}, \qquad r_i = \overline{P_i P} \tag{14}$$

zu berücksichtigen. Der Raumpunkt $P$, in dem die Kohärenz untersucht wird, sei so weit von der Strahleroberfläche entfernt, daß die von dort in $P$ eintreffenden Strahlen alle unter dem Winkel $\vartheta$ gegen die Flächennormale von der Strahleroberfläche auszugehen scheinen (vgl. Bild 4.1.1a). Für den Wegunterschied der von zwei verschiedenen Punkten $P_1$ und $P_2$ der Strahleroberfläche ausgehenden Strahlen erhält man

$$r_2 - r_1 = \Delta p \sin \vartheta, \tag{15}$$

worin

$$\Delta p = \overline{P_1 P_2} \tag{15a}$$

den Abstand der beiden Elementarstrahler angibt.

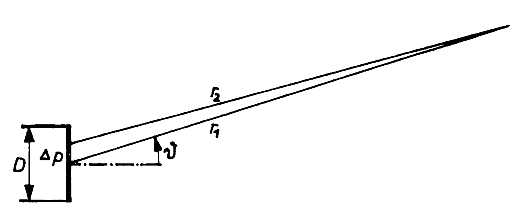



Bild 4.1.1a. Zur Kohärenzbedingung

Für ein Strahlenbündel im Winkelbereich zwischen $+\vartheta$ und $-\vartheta$ gegen die Oberflächennormale folgt bei kleinem Öffnungswinkel aus (14) und (15) als maximale Phasendifferenz infolge unterschiedlicher Weglängen

$$\Delta\delta = \frac{4\pi D}{\lambda} \sin \vartheta. \tag{16}$$

Darin bezeichnet $D$ die Ausdehnung der Lichtquelle.
Bei regellos verteilten Phasenverschiebungen $\delta_{0i}$ der ausgehenden Elementarwellen kann sich zwischen zwei unter verschiedenen Winkeln $\vartheta_1$ und $\vartheta_2$ fortpflanzenden resultierenden Wellen nur dann eine feste Phasendifferenz einstellen, wenn die Wegdifferenzen zwischen den äußersten Strahlen des Bündels zu vernachlässigen sind; d. h., die Wegdifferenzen müssen klein gegen die Wellenlänge und die Phasendifferenzen klein gegen $2\pi$ sein:

$$\Delta\delta \ll 2\pi. \tag{17}$$

Daraus erhält man auf Grund von (16) die Kohärenzbedingung

$$\boxed{D \sin \vartheta \ll \frac{\lambda}{2}} \tag{18}$$

(vgl. 4.1.6.).

**Beispiel 4.1.1. Kohärenzbedingung**

Bei 0,1 mm Strahlerabmessung und Licht der Wellenlänge 500 nm muß

$$\sin\vartheta \ll \frac{500 \cdot 10^{-9}\ \mathrm{m}}{2 \cdot 10^{-4}\ \mathrm{m}} = 2{,}5 \cdot 10^{-3}$$

sein. Der Öffnungswinkel $2\vartheta$ muß klein gegen zwanzig Bogenminuten sein, d. h., er darf ein bis zwei Bogenminuten nicht wesentlich übersteigen.



## Probleme

### 4.1.1. Interferenzversuch von Young

Von einer Lichtquelle wird durch einen Spalt der Breite $D = 0{,}2$ mm ein Lichtbündel ausgeblendet. Der Mittelstrahl fällt nach Bild 4.1.1b senkrecht auf eine Ebene im Abstand $A = 5$ m genau in die Mitte zwischen zwei Spalte $Q_1$ und $Q_2$. Die Breite dieser Spalte sei klein gegen ihren Abstand $d = 0{,}5$ mm.

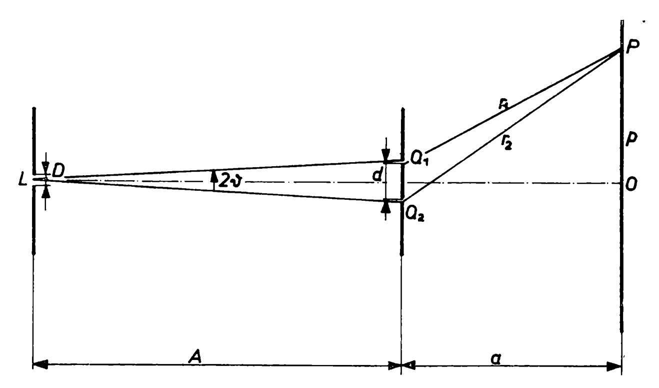



Bild 4.1.1b. Interferenzversuch von Young und Kohärenzbedingung

Auf einer Platte, die sich im Abstand $a = 50$ cm von der Ebene der beiden Spalte befindet, werden Interferenzstreifen beobachtet. Der Abstand zweier dunkler bzw. zweier heller Streifen betrage 0,59 mm. Untersuchen Sie, ob die Kohärenzbedingung erfüllt ist, und berechnen Sie die Wellenlänge des Lichtes.

**Lösung:**

Die Spalte erzeugen kohärente Wellen, wenn die Kohärenzbedingung (4.1./18) erfüllt ist. Im vorliegenden Fall erhält man

$$\sin\vartheta = \frac{d}{A} = \frac{5 \cdot 10^{-4}\ \mathrm{m}}{5\ \mathrm{m}} = 10^{-4}$$

und somit

$$D \sin\vartheta = 2 \cdot 10^{-4} \cdot 10^{-4}\ \mathrm{m} = 2 \cdot 10^{-8}\ \mathrm{m}.$$

Sichtbares Licht tritt ab Wellenlängen von 400 nm $= 4 \cdot 10^{-7}$ m auf. Die Kohärenzbedingung ist daher erfüllt.

Wir definieren als $z$-Achse die senkrecht zur Blendenebene durch den Mittelpunkt zwischen den beiden Spalten verlaufende Gerade. Kennzeichnet $p$ den Abstand des Beobachtungspunktes $P$ von der $z$-Achse, so folgt

$$r_1^2 = a^2 + \left(p - \frac{d}{2}\right)^2, \tag{1}$$

$$r_2^2 = a^2 + \left(p + \frac{d}{2}\right)^2. \tag{2}$$

Für $a \gg p$, $a \gg d$ ergibt sich

$$r_2 - r_1 = \frac{r_2^2 - r_1^2}{r_1 + r_2} = \frac{pd}{a} \tag{3}$$

und damit als Phasendifferenz zwischen beiden Wellen

$$\delta = \frac{2\pi pd}{a\lambda}. \tag{4}$$

Interferenzmaxima treten nach (4.1./10) für $\delta = \delta_{\max} = 2h\pi$, d. h. für

$$p_{\max} = h\,\frac{a\lambda}{d} \qquad (h = 0, \pm 1, \pm 2, \ldots) \tag{5}$$

auf.
Dunkle Streifen erhält man nach (4.1./11) für

$$p_{\min} = \pm\left(h + \frac{1}{2}\right)\frac{a\lambda}{d} \qquad (h = 0, 1, 2, \ldots). \tag{6}$$

Der Abstand zweier heller bzw. zweier dunkler Streifen voneinander beträgt somit

$$\Delta p = \frac{a\lambda}{d}. \tag{7}$$

Mit den vorgegebenen Werten folgt daraus für die Wellenlänge

$$\lambda = \frac{d}{a}\,\Delta p = \frac{0{,}50 \cdot 10^{-3}}{0{,}50} \cdot 0{,}59 \cdot 10^{-3}\ \text{m} = 590\ \text{nm}.$$

### 4.1.2. Optisches Gitter

$p$ spaltförmige Öffnungen seien gleichmäßig nebeneinander angeordnet. Die Breite $a$ einer Öffnung sei klein gegen die Wellenlänge. Auf das Gitter falle senkrecht eine monochromatische, linear polarisierte ebene Lichtwelle. In sehr großem Abstand von der Gitterebene befinde sich ein Schirm, der die interferierenden Strahlen auffängt. Der Abstand zwischen Gitterebene und Schirm sei so groß, daß von einem Punkt des Schirmes alle Punkte des Gitters unter dem gleichen Beugungswinkel erscheinen (vgl. Bild 4.1.2).
Bestimmen Sie die Lage der Intensitätsmaxima und -minima. Wie groß ist das Verhältnis zwischen einem Hauptmaximum und dem benachbarten Nebenmaximum, wenn die Anzahl $p$ der Spaltöffnungen sehr groß ist? Welcher Winkelabstand ergibt sich zwischen einem Hauptmaximum und dem benachbarten Minimum? Berechnen Sie die abgeleiteten Größen für $\lambda = 569$ nm, $p = 100$. Die Brechzahl des Ausbreitungsmediums sei $n = 1$. Der Abstand $d$ zweier Spalte betrage $d = 1{,}25$ µm.

**Lösung:**

Wir betrachten die unter dem Beugungswinkel $\vartheta$ ausgehenden $p$ parallelen Strahlen. Die Amplitude ist bei allen Strahlen gleich. Zwischen zwei benachbarten Strahlen tritt die Phasendifferenz $\delta$ auf. Daher folgt für die resultierende Feldstärke

$$E = E_0\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}(\omega t - kz)}(1 + \mathrm{e}^{\mathrm{i}\delta} + \mathrm{e}^{2\mathrm{i}\delta} + \cdots + \mathrm{e}^{\mathrm{i}(p-1)\delta}). \tag{1}$$

Wegen

$$\sum_{\nu=0}^{p-1} \mathrm{e}^{\mathrm{i}\nu\delta} = \frac{\mathrm{e}^{\mathrm{i}p\delta} - 1}{\mathrm{e}^{\mathrm{i}\delta} - 1} = \mathrm{e}^{\mathrm{i}\frac{(p-1)\delta}{2}} \frac{\sin\frac{p\delta}{2}}{\sin\frac{\delta}{2}} \tag{2}$$

ergibt sich

$$E = E_0 \frac{\sin\frac{p\delta}{2}}{\sin\frac{\delta}{2}}\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}\left(\omega t - kz + \frac{p-1}{2}\delta\right)}. \tag{3}$$

Als Intensität der Überlagerung aller $p$ Wellen erhält man

$$EE^* = E_0^2 \frac{\sin^2\frac{p\delta}{2}}{\sin^2\frac{\delta}{2}}. \tag{4}$$

Wie aus der L'HOSPITALschen Regel folgt, treten Maxima für

$$\delta = \pm 2h\pi \qquad (h = 0, 1, 2, \ldots) \tag{5}$$

auf. Sie heißen **Hauptmaxima**. $h$ gibt die **Ordnung der Interferenz** an. Die Intensität für ein Hauptmaximum beträgt nach (4)

$$(EE^*)_{\mathrm{HM}} = E_0^2 p^2. \tag{6}$$

Zwischen zwei benachbarten Hauptmaxima befinden sich $p - 1$ Minima. Für den Bereich $\delta = 0 \cdots \delta = 2\pi$ liegen sie bei

$$\delta = \frac{2h\pi}{p} \qquad (h = 1, 2, \ldots, p - 1). \tag{7}$$

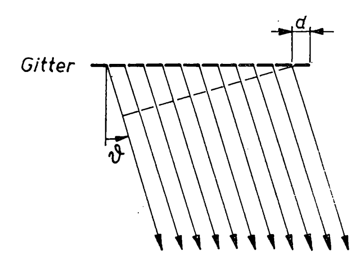



Bild 4.1.2. Optisches Gitter

Der Abstand zweier Minima beträgt

$$\Delta\delta = \frac{2\pi}{p} \tag{8}$$

(vgl. Bild 4.1.3). Zwischen zwei Minima, in denen die Intensität verschwindet, befindet sich ein Nebenmaximum. Es erreicht nicht die Höhe eines Hauptmaximums. Die Lage der Nebenmaxima ist genähert durch

$$\delta = 2h\pi \pm \frac{\pi}{p}(2h + 1) \tag{8a}$$

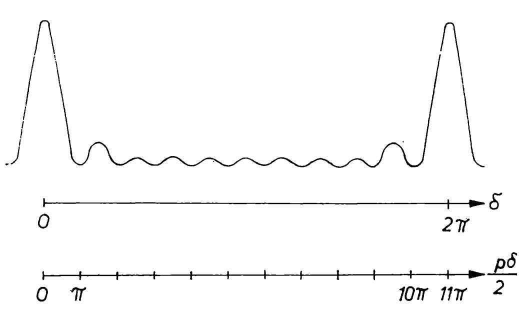



Bild 4.1.3. Interferenzversuch an einem Gitter für $p = 1$

bestimmt. Für das Verhältnis zwischen einem Haupt- und dem benachbarten Nebenmaximum folgt für große Werte $p$ genähert

$$\frac{(EE^*)_{\mathrm{HM}}}{(EE^*)_{\mathrm{NM}}} = (E_0{}^2 p^2) : \left(\frac{E_0{}^2}{\sin^2 \dfrac{3\pi}{2p}}\right) = \left(\frac{3\pi}{2}\right)^2 \approx 20. \tag{9}$$

Zwischen dem Beugungswinkel $\vartheta$ und der Phasendifferenz $\delta$ zweier benachbarter Strahlen besteht die Beziehung

$$\delta = \frac{2\pi n d}{\lambda_0} \sin\vartheta. \tag{10}$$

Die Bedingung (5) für Hauptmaxima bedeutet

$$\frac{nd \sin\vartheta}{\lambda_0} = \frac{nd \sin\vartheta_{\mathrm{M}h}}{\lambda_0} = h \qquad (h = 0, 1, 2, \ldots). \tag{11}$$

Nullstellen der Intensität treten nach (7) bzw. (4) bei

$$\frac{nd \sin\vartheta}{\lambda_0} = \frac{nd \sin\vartheta_h}{\lambda_0} = \frac{h'}{p} \qquad (h' = 1, 2, \ldots, p - 1, p + 1, \ldots; h \neq p, 2p, \ldots)$$

auf. Der Winkelabstand zwischen zwei Minima mit einem dazwischenliegenden Nebenmaximum ist somit durch

$$\sin\vartheta_{h+1} - \sin\vartheta_h = \frac{\lambda_0}{nd}\frac{1}{p} \tag{12}$$

gegeben.

An der Stelle des dazwischenliegenden Hauptmaximums mit $h = p$ ist $\sin \vartheta_p = 0$. Für $\sin \vartheta_{p+1}$ kann man genähert $\vartheta_1$ setzen. Als Winkelabstand zwischen einem Hauptmaximum und dem darauffolgenden Minimum erhält man daraus

$$\Delta\vartheta = \vartheta_1 = \frac{\lambda_0}{nd} \frac{1}{p}. \tag{13}$$

Mit den vorgegebenen Werten folgt für die Lage des ersten Hauptmaximums nach (11)

$$\sin \vartheta_{M1} = \frac{569 \cdot 10^{-9}\,\mathrm{m}}{1{,}25 \cdot 10^{-6}\,\mathrm{m}} = 0{,}4552, \quad \vartheta_{M1} = 27^\circ\,05'.$$

Als Winkelabstand zwischen dem ersten Hauptmaximum und dem folgenden Minimum ergibt sich nach (13)

$$\Delta\vartheta = \vartheta_1 = \frac{\sin \vartheta_{M1}}{100} = 0{,}004552,$$

das entspricht $15\,\frac{1}{2}$ Winkelminuten.

### 4.1.3. Auflösungsvermögen des optischen Gitters

Die Hauptmaxima der Wellenlängen $\lambda$ und $\lambda + \Delta\lambda$ können gerade noch voneinander getrennt werden, wenn das Hauptmaximum der Wellenlänge $\lambda$ auf das zu $\lambda + \Delta\lambda$ gehörende erste Minimum nach dem Hauptmaximum fällt (vgl. Bild 4.1.4). Als Auflösungsvermögen $A$ eines Inter-

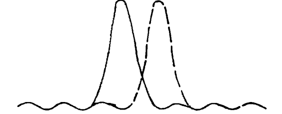


Bild 4.1.4. Zwei trennbare Hauptmaxima

ferenzspektrographen definiert man das Verhältnis der Wellenlänge $\lambda$ zur Wellenlängendifferenz $\Delta\lambda$, die gerade noch getrennt werden kann:

$$A = \frac{\lambda}{\Delta\lambda}. \tag{1}$$

Die beiden D-Linien des Natriumlichtes haben die Wellenlängen $\lambda_1 = 589{,}6$ nm, $\lambda_2 = 589{,}0$ nm. Wieviel Striche $p$ muß ein Gitter mindestens haben, um in erster Ordnung diese beiden Linien auflösen zu können?

**Lösung:**

Nach (4.1.2./7) beträgt der Abstand zwischen einem Hauptmaximum und dem benachbarten Minimum

$$\Delta\delta = \frac{2\pi}{p}. \tag{2}$$

Ferner besteht nach (4.1.2./10) die Beziehung

$$\frac{p\delta}{2} = \frac{\pi p n d \sin\vartheta}{\lambda_0}. \tag{3}$$

Bei einem Hauptmaximum ist nach (4.1.2./5)

$$\frac{p\delta}{2} = ph\pi. \tag{4}$$

Für das benachbarte Minimum mit dem Beugungswinkel $\vartheta + \Delta\vartheta$ gilt nach (3) und (4)

$$\frac{\pi pnd \sin(\vartheta + \Delta\vartheta)}{\lambda_0} = ph\pi \pm \pi. \tag{5}$$

Wegen $\sin(\vartheta + \Delta\vartheta) = \sin\vartheta + \Delta\vartheta\cos\vartheta$ folgt daraus

$$\Delta\vartheta = \pm\frac{\lambda_0}{pnd\cos\vartheta}. \tag{6}$$

Ändert sich die Wellenlänge von $\lambda_0$ auf $\lambda_0 + \Delta\lambda_0$, so ergibt sich nach (4.1.2./11)

$$\sin(\vartheta + \Delta\vartheta) = \sin\vartheta + \Delta\vartheta\cos\vartheta = \frac{h(\lambda_0 + \Delta\lambda_0)}{nd}, \tag{7}$$

d. h.

$$\Delta\vartheta = \frac{h\,\Delta\lambda_0}{nd\cos\vartheta}. \tag{8}$$

Aus dem Vergleich von (6) und (8) ergibt sich

$$\boxed{\frac{\lambda_0}{\Delta\lambda_0} = \frac{\lambda}{\Delta\lambda} = hp}\,. \tag{9}$$

(9) gilt allgemein: Das Auflösungsvermögen ist gleich der **Ordnung der Interferenz** multipliziert mit der **Anzahl $p$ der interferierenden Strahlen.**
Sollen in erster Ordnung $h = 1$ die beiden vorgegebenen Wellenlängen mit $\Delta\lambda_0 = \lambda_1 - \lambda_2 = 0{,}6$ nm noch getrennt werden können, muß ein Gitter aus mindestens

$$p = \frac{589{,}6\ \text{nm}}{0{,}6\ \text{nm}} = 983 \approx 1000$$

Strichen vorliegen.

## 4.1.4. Auflösungsvermögen eines Prismas

Berechnen Sie das Auflösungsvermögen $\frac{\lambda}{\Delta\lambda}$ für ein Prisma. Auf dieses falle paralleles Licht der Wellenlänge $\lambda = 650$ nm. Die Brechzahl sei $n = 1{,}67$, ihre Veränderung mit der Wellenlänge durch

$$\left(\frac{\mathrm{d}n}{\mathrm{d}\lambda}\right)_{\lambda=650\text{nm}} = 0{,}28 \cdot 10^6\ \text{m}^{-1}$$

gegeben. Das Prisma sei gleichschenklig (vgl. Bild 4.1.5). Die Länge eines Schenkels von der Spitze bis zur Basis betrage $b = 7{,}5$ cm. Der Winkel zwischen beiden Schenkeln sei $2\psi = 52°$.

**Lösung:**

Nach dem FERMATschen Prinzip ist die optische Weglänge für alle betrachteten Strahlen gleich. Es gilt daher für die äußeren Strahlen bei der Wellenlänge $\lambda$

$$\overline{A'C} + \overline{CB'} = n\overline{AB}. \tag{1a}$$

Bezeichnet man $\overline{A'C} + \overline{CB'}$ mit $l_1$, $\overline{AB}$ mit $l_2$, so kann man anstelle von (1a) auch

$$l_1 - nl_2 = 0 \tag{1}$$

schreiben.
Für die folgenden Betrachtungen ist es zweckmäßig, die optischen Weglängen auf die Wellenlänge $\lambda$ zu beziehen. Definiert man

$$\Delta s(\lambda) = \frac{l_1 - nl_2}{\lambda}, \tag{2}$$

dann ist der Strahlengang im Prisma durch

$$\Delta s(\lambda) = 0 \tag{3}$$

festgelegt.
Für die Wellenlänge $\lambda + \Delta\lambda$ verändert sich der Strahlengang und wird durch

$$\Delta s(\lambda + \Delta\lambda) = 0 \tag{4}$$

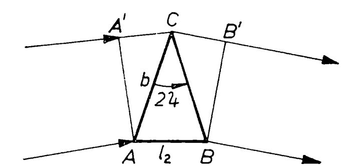



Bild 4.1.5. Prisma mit Strahlengang für die Wellenlänge $\lambda$

bestimmt. Wir betrachten die Änderung der Wegdifferenz beim Licht der Wellenlänge $\lambda + \Delta\lambda$ gegenüber der Wegdifferenz beim Licht der Wellenlänge $\lambda$, wenn die ursprünglichen Wege für $\lambda$ beibehalten werden, d. h. die Strecken $l_1$ und $l_2$ fest sind. Es folgt aus (3) und (1)

$$\delta\,\Delta s = \left(-\frac{l_1}{\lambda^2} + \frac{nl_2}{\lambda^2} - \frac{l_2}{\lambda}\frac{\mathrm{d}n}{\mathrm{d}\lambda}\right)\delta\lambda = -\frac{l_2}{\lambda}\frac{\mathrm{d}n}{\mathrm{d}\lambda}\,\delta\lambda. \tag{5}$$

Die beiden Frequenzen sind gerade noch zu trennen, wenn das Maximum für $\lambda$ auf das erste Minimum für $\lambda + \mathrm{d}\lambda$ fällt. Dann löscht sich das über den Weg für $\lambda$ geführte Licht durch die Interferenz gerade gegenseitig aus. Da für $\lambda$ der Wegunterschied zwischen den beiden äußeren Strahlen gleich Null ist, muß er somit für $\lambda + \mathrm{d}\lambda$ gleich einer Wellenlänge sein. Es ergibt sich damit als Bedingung dafür, daß die beiden verschiedenen Wellen noch getrennt werden können,

$$\delta\,\Delta s = \pm 1. \tag{6}$$

Aus (5) folgt in Verbindung mit (6), wenn $\delta\lambda = \Delta\lambda$ gesetzt wird,

$$\frac{\lambda}{\Delta\lambda} = l_2\left|\frac{\mathrm{d}n}{\mathrm{d}\lambda}\right|. \tag{7}$$

Berücksichtigt man

$$l_2 = 2b\cos\psi, \tag{8}$$

so ergibt sich schließlich

$$\frac{\lambda}{\Delta\lambda} = 2b\left|\frac{\mathrm{d}n}{\mathrm{d}\lambda}\right|\cos\psi. \tag{9}$$

Mit den vorgegebenen Werten erhalten wir

$$\frac{\lambda}{\Delta\lambda} = 2 \cdot 7{,}5 \cdot 10^{-2} \cdot 0{,}28 \cdot 10^{6} \cdot 0{,}899 = 3{,}78 \cdot 10^{4}.$$

## 4.1.5. Interferenz an planparalleler Schicht

Auf eine dünne planparallele Schicht der Dicke $d' = 0{,}5$ µm fällt eine monochromatische, linear polarisierte Lichtwelle. Dabei entsteht durch wiederholte Reflexionen eine Aufspaltung in ein Bündel reflektierter und ein Bündel gebrochener parallel laufender Strahlen (vgl. Bild 4.1.6). Berechnen Sie die Intensität der resultierenden reflektierten und der resultierenden gebrochenen Welle. Wie groß ist die Intensität der einzelnen Strahlen? Es werde angenommen, die Zahl der einzelnen Strahlen sei auf jeder Seite unendlich groß. Der Einfallswinkel sei $\alpha = 60°$, die Brechzahl $n = 1{,}6$, die Wellenlänge des Lichtes im Vakuum $\lambda_0 = 569$ nm. Für die relative Amplitude der reflektierten Welle ergebe sich nach den FRESNELschen Formeln bei der vorgegebenen Polarisation $R = 0{,}2$. Für welche Einfallswinkel tritt nur ein durchgehender Strahl auf?

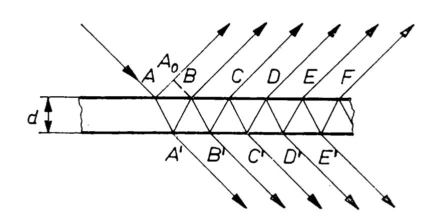



Bild 4.1.6. Planparallele Platte

**Lösung:**

Jede Reflexion und jede Brechung verkleinern die Intensität und führen damit zu einem Faktor $r^2 < 1$. Gegenüber 4.1.2. tritt infolge der Amplitudenschwächung bei der Feldstärke ein Faktor $r$ auf. Man erhält daher anstelle von (4.1.2./1)

$$E = E_0\, e^{i(\omega t - kz)}(1 + r\, e^{i\delta} + r^2\, e^{2i\delta} + \cdots + r^{p-1}\, e^{i(p-1)\delta})$$

$$= E_0 \frac{1 - r^p\, e^{ip\delta}}{1 - r\, e^{i\delta}}\, e^{i(\omega t - kz)}. \tag{1}$$

Für die Intensität der $p$ Einzelwellen resultiert hieraus

$$EE^* = E_0{}^2 \frac{1 + r^{2p} - 2r^p \cos p\delta}{1 + r^2 - 2r \cos \delta}. \tag{2}$$

Wegen $\cos \delta = 1 - \sin^2 \frac{\delta}{2}$ ergibt sich

$$EE^* = E_0{}^2 \frac{(1 - r^p)^2 + 4r^p \sin^2 \frac{p\delta}{2}}{(1 - r)^2 + 4r \sin^2 \frac{\delta}{2}}. \tag{3}$$

Die Phasendifferenz beträgt zwischen zwei benachbarten Strahlen

$$\delta = \frac{2\pi}{\lambda_0} [(\overline{AA'} + \overline{A'B})\, n - \overline{AA_0}] = \frac{4\pi d'}{\lambda_0} \left(\frac{n}{\cos \alpha'} - \tan \alpha' \sin \alpha\right). \tag{4}$$

Auf Grund des Brechungsgesetzes folgt daraus

$$\delta = \frac{4\pi n d'}{\lambda_0} \cos \alpha'. \tag{5}$$

Darin bezeichnet $\alpha$ den Einfallswinkel in Luft, $\alpha'$ den Brechungswinkel in Glas. Die Phasenverschiebungen beim Übergang von Luft in Glas bzw. von Glas in Luft heben sich heraus.
Für $p \to \infty$ verschwinden in (3) alle Summanden mit dem Faktor $r^p$.
Die Amplituden für die Reflexion Luft an Glas und Glas an Luft unterscheiden sich nach den FRESNELschen Formeln (vgl. A 2.1.20.) nur durch das Vorzeichen. Eine Reflexion Luft an Glas bedingt daher bei der Berechnung der Intensität relativ zur einfallenden Welle den Faktor $R^2$, eine Brechung von Glas an Luft den Faktor $1 - R^2$. Dadurch ergeben sich für die relativen Intensitäten der bei $A$, $B$, $C$, $D$, ... ausgehenden Strahlen die Werte $R^2$, $(1 - R^2)^2 R^2$, $(1 - R^2)^2 \times R^6$, $(1 - R^2)^2 R^{10}$, .... Für die relativen Intensitäten der bei $A'$, $B'$, $C'$, ... ausgehenden Strahlen folgt dagegen $(1 - R^2)^2$, $(1 - R^2)^2 R^4$, $(1 - R^2)^2 R^8$, .... Bis auf den bei $A$ reflektierten Strahl tritt also gegenüber dem folgenden benachbarten Strahl ein Intensitätsfaktor $R^4$ auf. Ihm entspricht der Feldstärkefaktor

$$r = R^2. \tag{6}$$

Wir berechnen zunächst die Intensität der resultierenden gebrochenen Welle. Hierfür erhalten wir, wenn wir in (3) die Beziehungen (5) und (6) berücksichtigen und beim gebrochenen Anteil $E_0^2$ durch $E_0^2(1 - R^2)^2$ ersetzen,

$$(EE^*)_\mathrm{d} = E_0^2 \frac{(1 - R^2)^2}{(1 - R^2)^2 + 4R^2 \sin^2 \left(\frac{2\pi d' n}{\lambda_0} \cos \alpha'\right)}. \tag{7}$$

Für die Intensität der resultierenden reflektierten Welle ergibt sich nach dem Energiesatz

$$(EE^*)_\mathrm{r} = E_0^2 \frac{4R^2 \sin^2 \left(\frac{2\pi d' n}{\lambda_0} \cos \alpha'\right)}{(1 - R^2)^2 + 4R^2 \sin^2 \left(\frac{2\pi d' n}{\lambda_0} \cos \alpha'\right)}. \tag{8}$$

Mit den vorgegebenen Werten erhalten wir $\cos \alpha' = 0{,}8410$ und damit

$$\frac{(EE^*)_\mathrm{d}}{E_0^2} = \frac{(1 - 0{,}2^2)^2}{0{,}96^2 + 4 \cdot 0{,}04 \sin^2 \frac{2\pi \cdot 5 \cdot 10^{-7} \cdot 1{,}6 \cdot 0{,}8410}{569 \cdot 10^{-9}}} = 0{,}874.$$

Mit (8) erhält man für die Intensität der reflektierten Welle

$$\frac{(EE^*)_\mathrm{r}}{E_0^2} = 1 - 0{,}874 = 0{,}126.$$

Soll nur ein durchgehender Strahl auftreten, so muß nach (8)

$$\frac{\delta}{2} = \pm h\pi \qquad (h = 0, 1, 2, \ldots) \tag{9}$$

sein.

### 4.1.6. Fresnelscher Spiegelversuch

Eine kleine, als punktförmig vorausgesetzte Lichtquelle L befindet sich weitab von zwei schwach gegeneinander geneigten, nahe benachbarten Planspiegeln, durch die zwei sekundäre Lichtquellen $L_1$ und $L_2$ erzeugt werden. Von diesen gehen zwei unter dem Winkel $2\vartheta$ gekreuzte kohärente Wellen aus.

Die Lichtquelle sende die beiden D-Linien des Natriumlichtes aus. Näherungsweise können die Amplituden jeder der beiden Schwingungen gleichgesetzt werden. Untersuchen Sie die Interferenzerscheinungen. Die Spiegel seien unter dem Winkel $\vartheta = 0{,}5'$ gegeneinander geneigt.

**Lösung:**

Wir betrachten zunächst zwei monochromatische, sich unter dem Winkel $2\vartheta$ schneidende kohärente Wellen. Mit dem in Bild 4.1.7 zugrunde liegenden Koordinatensystem haben die Strahlen die Richtungscosinus

$$(\sin\vartheta,\ 0,\ \cos\vartheta)\,; \qquad (-\sin\vartheta,\ 0,\ \cos\vartheta)\,.$$

Die elektrischen Vektoren sind

$$E_1 = E_0\, \mathrm{e}^{\mathrm{i}[\omega t - k(-x\sin\vartheta + z\cos\vartheta)]}, \tag{1}$$

$$E_2 = E_0\, \mathrm{e}^{\mathrm{i}[\omega t - k(x\sin\vartheta + z\cos\vartheta)]}. \tag{2}$$

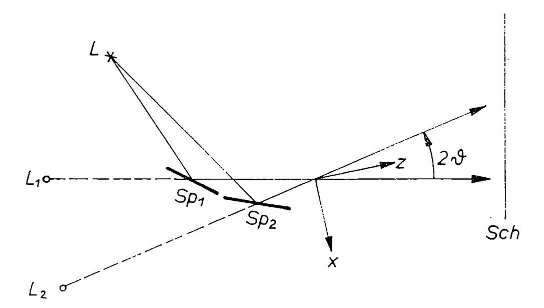



Bild 4.1.7. FRESNELscher Spiegelversuch.
L Lichtquelle, $L_1$, $L_2$ virtuelle Lichtquellen, Sch Auffangschirm

Für die resultierende Feldstärke erhält man

$$E = E_0(\mathrm{e}^{\mathrm{i}kx\sin\vartheta} + \mathrm{e}^{-\mathrm{i}kx\sin\vartheta})\, \mathrm{e}^{\mathrm{i}(\omega t - kz\cos\vartheta)} \tag{3}$$

und daraus für die Intensität

$$EE^* = 4E_0^2 \cos^2 (kx \sin\vartheta). \tag{4}$$

Nach (1) und (2) tritt zwischen den beiden Wellen ein von der Koordinate $x$ abhängiger Phasenunterschied

$$\delta = 2\, kx \sin\vartheta \tag{5}$$

auf. Mit diesem kann man für die Intensität

$$EE^* = 4E_0^2 \cos\frac{\delta}{2} = 2E_0^2\,(1 + \cos\delta) \tag{6}$$

schreiben. Die Maxima der Intensität des monochromatischen Lichtes liegen somit bei

$$\delta = \pm 2h\pi \tag{7}$$

bzw.

$$x = \pm\frac{h}{2}\,\frac{\lambda}{\sin\vartheta} \qquad (h = 0, 1, 2, \ldots). \tag{8}$$

Genau in der Mitte dazwischen befinden sich Minima mit der Intensität Null. Werden von L zwei Frequenzen $\omega_1$ und $\omega_2$ ausgestrahlt, so überlagert sich ihre Interferenz. Bei gleicher Amplitude beider Schwingungen folgt nach (5) und (6) für ihre Intensitäten

$$(EE^*)_i = 2E_0^2 \left[1 + \cos\left(\frac{4\pi x}{\lambda_i} \sin\vartheta\right)\right] \qquad (i = 1, 2). \tag{9}$$

Wegen der Inkohärenz ergibt sich für die gesamte Intensität

$$EE^* = (EE^*)_1 + (EE^*)_2 = 2E_0^2 \left(2 + \cos\frac{4\pi x \sin\vartheta}{\lambda_1} + \cos\frac{4\pi x \sin\vartheta}{\lambda_2}\right). \tag{10}$$

Setzt man

$$\beta = 2\tan\vartheta \approx 2\sin\vartheta \tag{11}$$

(vgl. Bild 4.1.7), so ergibt sich aus (10)

$$EE^* = 4E_0^2 \left[1 + \cos\beta\pi x\left(\frac{1}{\lambda_1} - \frac{1}{\lambda_2}\right) \cos\beta\pi x\left(\frac{1}{\lambda_1} + \frac{1}{\lambda_2}\right)\right]. \tag{12}$$

Wir setzen genähert $\lambda_1 + \lambda_2 = 2\lambda$, $\lambda_1 \cdot \lambda_2 = \lambda^2$ und schreiben $\lambda_2 - \lambda_1 = \Delta\lambda$. Damit folgt aus (10)

$$EE^* = 4E_0^2 \left(1 + \cos\frac{\beta\pi x\,\Delta\lambda}{\lambda^2} \cos\frac{2\beta\pi x}{\lambda}\right). \tag{13}$$

$\cos\frac{\beta\pi x\,\Delta\lambda}{\lambda^2}$ ist längs der $x$-Achse langsam veränderlich gegenüber $\cos\frac{2\beta\pi x}{\lambda}$. (12) stellt daher eine **räumliche Lichtschwebung** dar. Gebiete mit gleichmäßiger Helligkeit wechseln mit Gebieten deutlich ausgeprägter Interferenzstreifen. In der Umgebung von

$$\cos\frac{\beta\pi x\,\Delta\lambda}{\lambda^2} = 0, \tag{14}$$

d. h. bei

$$x = \frac{\lambda^2}{\beta\,\Delta\lambda}\,\frac{2i + 1}{2} \qquad (i = 0, \pm 1, \pm 2, \ldots), \tag{14a}$$

beobachtet man räumlich eine gleichmäßige Helligkeit. Die Interferenzstreifen sind hier verschwunden. Der Abstand zweier derartiger Stellen, in denen Interferenzen nicht festzustellen sind, beträgt

$$(\Delta x)_\mathrm{U} = \frac{\lambda^2}{\beta\,\Delta\lambda}. \tag{15}$$

Dagegen erhält man in der Umgebung von

$$\cos\frac{\beta\pi x\,\Delta\lambda}{\lambda^2} = 1 \tag{16}$$

deutlich ausgeprägte Helligkeitsmaxima für

$$\cos\frac{2\beta\pi x}{\lambda} = 1 \qquad \text{bzw.} \qquad x = \frac{\lambda}{\beta}\,i \qquad (i = 0, \pm 1, \pm 2, \ldots). \tag{16a}$$

Der Abstand zweier Maxima beträgt

$$(\Delta x)_\mathrm{M} = \frac{\lambda}{\beta}. \tag{17}$$

Zwischen zwei Stellen gleichmäßiger Helligkeit liegen somit

$$Z = \frac{(\Delta x)_U}{(\Delta x)_M} = \frac{\lambda}{\Delta \lambda} \tag{18}$$

Interferenzstreifen.
Mit den vorgegebenen Werten erhalten wir aus (11)

$$\beta = 2\vartheta = \frac{\pi}{60 \cdot 180} = 2{,}91 \cdot 10^{-4}\,\text{rad}.$$

Für den Abstand zweier Maxima ergibt sich nach (17)

$$(\Delta x)_M = \frac{589 \cdot 10^{-9}}{2{,}91 \cdot 10^{-4}}\,\text{m} = 2{,}02\,\text{nm}.$$

Die Anzahl der Maxima zwischen zwei Stellen gleicher Helligkeit beträgt nach (18)

$$Z = \frac{\lambda}{\Delta\lambda} = \frac{589 \cdot 10^{-9}}{0{,}6 \cdot 10^{-9}} \approx 1000.$$

## 4.1.7. Michelson-Interferometer (Zweistrahlinterferenz)

Der Aufbau des MICHELSON-Interferometers ist in Bild 4.1.8 dargestellt:

Von einer ausgedehnten Lichtquelle L geht ein Strahlenbündel aus, das mit seinem Mittelstrahl unter 45° auf einen teildurchlässigen Spiegel Sp fällt. Er ist so versilbert, daß genau 50% der einfallenden Strahlung durchgeht. Sie trifft mit ihrem Mittelstrahl senkrecht auf den Planspiegel $Sp_1$, der sie vollständig zurückwirft.

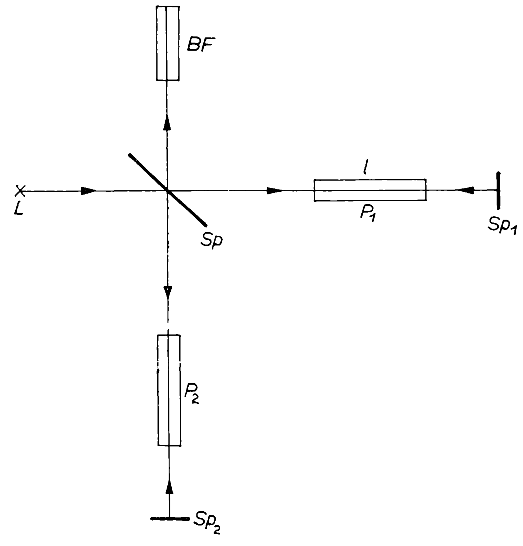



Bild 4.1.8. MICHELSON-Interferometer. Sp halbdurchlässiger Spiegel, $Sp_1$, $Sp_2$ Vollspiegel, $P_1$, $P_2$ Proben, BF Beobachtungsfernrohr, L Lichtquelle

Das vom halbdurchlässigen Spiegel Sp reflektierte Licht wird am Spiegel $Sp_2$ zurückgeworfen. Beide Strahlenbündel treffen bei Sp wieder zusammen und fallen gemeinsam in ein Beobachtungsfernrohr.
In den Strahlengang werden die Proben $P_1$ und $P_2$ nach Bild 4.1.8 gebracht. Probe $P_1$ sei eine Glasröhre der Innenlänge $l$, die Vakuum umschließt. In der Probe $P_2$ werde eine Glasröhre mit denselben Abmessungen und dem gleichen Material verwendet. In diese werde gleichmäßig Luft eingelassen, bis Normaldruck herrscht. Die Temperatur betrage 20 °C. Das Fernrohr sei auf die Proben eingestellt.
Wird von den beiden Glasröhren Vakuum umschlossen, so beobachtet man im Fernrohr ein System von Interferenzstreifen, d. h. wie beim FRESNELschen Spiegelversuch eine Folge heller und dunkler Linien. Beim Einfüllen von Luft in den zweiten Kolben ändert sich die Interferenzerscheinung: Die Streifen wandern über das Fadenkreuz des Fernrohrs. Ihre Anzahl $N$ kann durch Auszählen bestimmt werden. Es sei $l = 2{,}5$ cm. Das verwendete Licht habe die Wellenlänge $\lambda = 589$ nm. Dabei werden 24,8 Streifen gemessen. Berechnen Sie daraus die Brechzahl von Luft.

**Lösung:**

Die Brechzahl in Probe $P_1$ ist 1, in Probe $P_2$ $n_L$. Zwischen den Mittelstrahlen der beiden interferierenden Bündel entsteht der Gangunterschied

$$\Delta s = 2(n_L - 1)\, l. \tag{1}$$

Eine Verschiebung um eine Streifenbreite bedeutet, daß ein Wegunterschied von einer Wellenlänge $\lambda$ auftritt. Werden $N$ vorbeilaufende Interferenzstreifen beobachtet, beträgt der Gangunterschied

$$\Delta s = N\lambda. \tag{2}$$

Für die Abweichung der Brechzahl $n_L$ vom Wert eins folgt damit durch Gleichsetzen

$$n_L - 1 = N \frac{\lambda}{2l}. \tag{3}$$

Mit den vorgegebenen Werten erhält man

$$n_L - 1 = 24{,}8 \frac{589 \cdot 10^{-9}}{2 \cdot 2{,}5 \cdot 10^{-2}} = 0{,}000292.$$

## 4.1.8. Fourier-Spektroskopie mit dem Michelson-Interferometer

Im MICHELSON-Interferometer nach Bild 4.1.8 sei der Abstand des vollständig reflektierenden Spiegels $Sp_1$ vom teildurchlässigen Spiegel Sp verstellbar, während der Abstand $\overline{SpSp_2} = l$ fest sei. Bestimmen Sie die Intensität des interferierenden Lichtes im Beobachtungsfernrohr in Abhängigkeit vom Abstand $\overline{SpSp_1} = l + s$. Stellen Sie die Formel für die Intensität $L = L(s, k)$ des interferierenden Lichtes auf, wenn die Lichtquelle a) monochromatisch ist, b) das Spektrum

$$E_0 = E_0(k) \tag{1}$$

enthält $\left(k = \dfrac{2\pi}{\lambda}\right)$.

Die Auswertung der Meßergebnisse bei der spektroskopischen Untersuchung eines IR-Strahlers ergebe eine Intensitätsverteilung, die genähert durch

$$L(s) = L_0 + L_c\, \mathrm{e}^{-cs^2} \tag{2}$$

wiedergegeben werde, wobei

$$c = \frac{4 \ln 2}{\Delta s^2} \tag{2a}$$

mit der Halbwertbreite $\Delta s$ verknüpft ist (vgl. 1.4.7. bzw. 8.1.2.). $L_0$ kennzeichnet die Intensität einer der beiden von Sp nach $Sp_1$ oder $Sp_2$ gehenden Wellen, wenn die andere, z. B. durch einen Absorber oder durch Interferenz mit sich selbst, ausgeschaltet wird.

Die Messung ergebe $\Delta s = 0{,}48\lambda_0 = 0{,}48 \dfrac{2\pi}{k_0}$, wobei $\lambda_0$ die Wellenlänge größter Intensität des Strahlers bedeutet. Bestimmen Sie das Spektrum der Lichtquelle. Die Durchlässigkeit des Spiegels Sp sei für das gesamte beobachtete Spektrum 0,5.

**Lösung:**

In der Meßebene des Beobachtungsfernrohres erzeuge ein am Spiegel $Sp_2$ reflektierter monochromatischer Strahl die elektrische Feldstärke

$$E_2 = E_0 \cos \omega t. \tag{3}$$

Für die Feldstärke des von $Sp_1$ reflektierten Strahles folgt

$$E_1 = E_0 \cos (\omega t - 2\, ks). \tag{4}$$

Daraus ergibt sich für die Intensität der interferierenden Strahlung

$$L = \overline{(E_1 + E_2)^2} = E_0^2 \overline{[\cos \omega t + \cos (\omega t - 2ks)]^2}. \tag{5}$$

Aus

$$E_1 + E_2 = 2E_0 \cos ks \cos (\omega t - ks) \tag{6}$$

folgt wegen $\overline{\cos^2 \omega t} = \dfrac{1}{2}$

$$L = E_0^2 (1 + \cos 2\, ks). \tag{7}$$

Für eine Lichtquelle mit vorgegebenem Spektrum ist $E_0^2$ durch $E_0'^2\, \mathrm{d}k$ zu ersetzen und über den gesamten Spektralbereich zu integrieren:

$$L = \int_0^\infty E_0'^2(k)\, (1 + \cos 2\, ks)\, \mathrm{d}k. \tag{8}$$

$E_0'^2$ hat die Maßeinheit der spektralen Intensität. Die Größe

$$L_0 = \int_0^\infty E_0'^2\, \mathrm{d}k \tag{9}$$

kennzeichnet die Intensität einer der beiden Wellen allein. Für die Differenz zwischen der Intensität der beiden überlagerten Wellen und der Intensität nur einer Welle erhält man aus (8)

und (9)

$$L - L_0 = \int_0^\infty E_0'^2(k) \cos 2ks \, dk. \tag{10}$$

$E_0'^2$ ist eine reelle Funktion, die für positive Werte $k$ definiert ist. Sie kann in den Bereich negativer Werte $k$ als gerade Funktion

$$E_0'^2(k) = E_0'^2(-k) \tag{11}$$

fortgesetzt werden, ohne daß die Allgemeingültigkeit der Aussage eingeschränkt wird. Für eine **reelle, gerade Fourier-Transformierte** $\tilde{f}(\omega)$ kann nach (1.4.6./3) das FOURIER-Integral in der Form

$$f(t) = \frac{1}{\pi} \int_0^\infty \tilde{f}(\omega) \cos \omega t \, d\omega \tag{12}$$

geschrieben werden. Es stellt ebenfalls eine gerade und reelle Funktion dar. Für die FOURIER-Transformierte $\tilde{f}(\omega)$ ergibt sich aus (1.4.6./4)

$$\tilde{f}(\omega) = 2 \int_0^\infty f(t) \cos \omega t \, dt. \tag{13}$$

Ersetzt man daher formal in (10)

$$k \to \frac{\omega}{\pi}, \qquad s \to \frac{\pi t}{2}, \qquad E_0'^2 \to \tilde{f}, \qquad L - L_0 \to f, \tag{14}$$

so ergibt sich Übereinstimmung mit (12). Damit folgt aus (13)

$$E_0'^2 = \frac{4}{\pi} \int_0^\infty (L - L_0) \cos 2ks \, ds. \tag{15}$$

Wir setzen $L - L_0$ nach (2) ein und erhalten

$$E_0'^2 = \frac{4L_c}{\pi} \int_0^\infty e^{-cs^2} \cos 2ks \, ds. \tag{16}$$

Nach [8] ist

$$\int_0^\infty e^{-cs^2} \cos 2ks = \frac{\sqrt{\pi}}{2\sqrt{c}} e^{-\frac{k^2}{c}}, \tag{17}$$

so daß sich das Spektrum

$$E_0'^2(k) = \frac{2L_c}{\sqrt{\pi c}} e^{-\frac{k^2}{c}} = \frac{L_c \Delta s}{\sqrt{\pi} \ln 2} e^{-\frac{k^2 \Delta s^2}{4 \ln 2}} \tag{18}$$

ergibt. Mit den vorgegebenen Werten erhält man, wenn die konstanten Faktoren zusammengefaßt werden,

$$E_0'^2(k) = \text{const} \cdot e^{-\frac{0{,}48^2 \pi^2 k^2}{0{,}693 k_0^2}} = \text{const} \cdot e^{-3{,}28 \frac{k^2}{k_0^2}}.$$

### 4.1.9. Fabry-Perot-Interferenzspektrograph (Mehrstrahlinterferenz)

Beim Interferometer nach FABRY-PEROT wird die Interferenz durch eine planparallele Luftschicht erzeugt, die von zwei schwach keilförmigen Glasplatten mit ebenen Oberflächen begrenzt ist (vgl. Bild 4.1.9). Der Keilwinkel beträgt bis zu 20′. Durch diese Anordnung werden störende Reflexionen an den Rückseiten vermieden.
Ein auf die Luftschicht gerichteter monochromatischer Strahl wird an den Grenzflächen durch die Reflexion und die Brechung zerlegt. Zwischen den Grenzflächen finden Vielfachreflexionen statt, und es tritt ein Bündel paralleler Strahlen aus. Fallen diese auf eine Sammellinse, so werden sie in einem Punkt der Brennebene vereinigt.
Der FABRY-PEROT-Interferenzspektrograph werde von zwei Glasplatten mit der Brechzahl $n = 1{,}6$ begrenzt. Die Dicke der Luftschicht zwischen ihnen sei $d' = 100$ mm. Ein Lichtstrahl

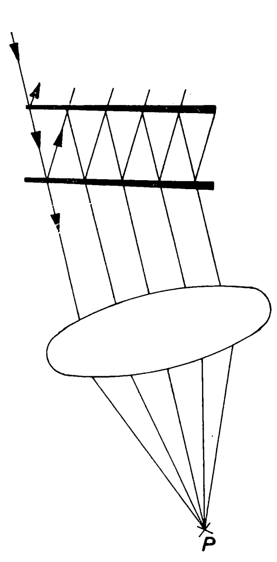



Bild 4.1.9. FABRY-PEROT-Interferenzspektrograph

mit Licht der Wellenlänge $\lambda = 600$ nm im Vakuum falle unter dem Winkel 15° auf die Trennfläche zwischen Glas und Luft. Die Anzahl der interferierenden Strahlen des durchgehenden Lichtes sei $p = 20$. Bestimmen Sie die Ordnung der Interferenz und das spektrale Auflösungsvermögen des Interferenzspektrographen.

**Lösung:**

Die relative Intensität des durch eine planparallele Schicht hindurchgehenden Lichtes ist nach (4.1.5./7) und (4.1.5./5) durch

$$\frac{(EE^*)_\mathrm{d}}{E_0^2} = \frac{(1 - R^2)^2}{(1 - R^2)^2 + 4R^2 \sin^2 \frac{\delta}{2}} \tag{1}$$

gegeben. Darin bedeutet $\delta$ die Phasenverschiebung zwischen zwei benachbarten Strahlen. Die Intensität nimmt ein Maximum für

$$\delta = \pm 2h\pi \qquad (h = 0{,}1, 2, \ldots) \tag{2}$$

an, in Übereinstimmung mit der Beugung eines Bündels paralleler Strahlen nach (4.1.2./5). Während die Untersuchung an der parallelen Schicht wegen des Überganges zu unendlich vielen Strahlen nur genähert gilt und nicht für die Intensitätsminima angewandt werden kann, gilt (4.1.2./5) auch für diese.
Nach (4.1.5./5) ist die Phasendifferenz zwischen zwei benachbarten Strahlen bei der Interferenz an einer planparallelen Schicht durch

$$\delta = \frac{4\pi n d' \cos\alpha'}{\lambda} \tag{3}$$

gegeben. Darin bedeutet $n$ die Brechzahl der planparallelen Schicht gegen das Einfallsmedium, $\lambda$ die Wellenlänge im Einfallsmedium und $\alpha'$ den Brechungswinkel. Führt man die Brechzahl des Einfallsmediums gegen Luft bzw. Vakuum

$$n_{\mathrm{E}} = \frac{1}{n}, \tag{4}$$

die Wellenlänge in Luft

$$\lambda_0 = n_{\mathrm{E}}\lambda \tag{5}$$

und auf Grund des Brechungsgesetzes

$$\sin\alpha = \frac{\sin\alpha'}{n_{\mathrm{E}}} = \frac{\sqrt{1 - \cos^2\alpha'}}{n_{\mathrm{E}}} \tag{6}$$

den Einfallswinkel $\alpha$ ein, so erhält man aus (3) für die Phasenverschiebung zwischen zwei benachbarten Strahlen

$$\delta = \frac{4\pi d'}{\lambda_0}\sqrt{1 - n_{\mathrm{E}}^2 \sin^2\alpha}\,. \tag{7}$$

Nach (2) ergibt sich damit für die Ordnung der Interferenz

$$h = \frac{2d'}{\lambda_0}\sqrt{1 - n_{\mathrm{E}}^2 \sin^2\alpha}\,. \tag{8}$$

Das spektrale Auflösungsvermögen für ein Bündel von $p$ parallelen Strahlen folgt aus 4.1.3. Danach erhält man

$$\frac{\lambda}{\Delta\lambda} = ph = \frac{2pd'}{\lambda_0}\sqrt{1 - n_{\mathrm{E}}^2 \sin^2\alpha}\,. \tag{9}$$

Mit den vorgegebenen Werten ergibt sich

$$\frac{\lambda}{\Delta\lambda} = \frac{2 \cdot 20 \cdot 0{,}1}{600 \cdot 10^{-9}}\sqrt{1 - \frac{1}{1{,}6^2} \cdot 0{,}2588^2} = 6{,}67 \cdot 10^6\,.$$

Für die Ordnung der Interferenz folgt

$$h = \frac{6{,}67 \cdot 10^6}{20} = 3{,}33 \cdot 10^5\,.$$

## A Aufgaben

A 4.1.1. Für welche Phasendifferenz $\delta$ ist die resultierende Intensität zweier interferierender Wellen gleich der Summe der Intensitäten beider Einzelwellen?

A 4.1.2. Mit parallelem Licht der Wellenlänge 649 nm wird ein Doppelspalt senkrecht angestrahlt. Der Auffangschirm befindet sich im Abstand 40 cm von der Spaltebene. Für den Abstand zweier dunkler Streifen erhält man 0,42 mm. Bestimmen Sie den Abstand der beiden Spalte voneinander.

A 4.1.3. Ein Schirm enthält zwei Spalte im Abstand $d$, der groß gegen die Spaltöffnung ist. Monochromatisches, paralleles Licht fällt unter dem Winkel $\vartheta_0$ gegen die Schirmnormale ein. Leiten Sie die Richtungen größter und kleinster Beugungsintensität ab.

A 4.1.4. **Sterninterferometer.** Der Abstand $d$ eines Doppelspaltes ist verstellbar. Von zwei weit entfernten Punkten $P$ und $P'$ fällt paralleles Licht auf den Doppelspalt. Er wird so eingestellt, daß es vom ersten Punkt $P$ senkrecht, vom zweiten

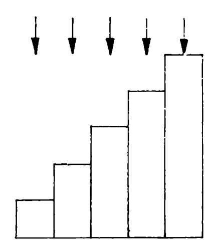


Bild 4.1.10. Stufengitter

$P'$ unter dem kleinen Winkel $\varepsilon$ gegen die Schirmnormale einfällt. Bei der Variation des Spaltabstandes $d$ stellt man größte Trennschärfe zwischen beiden Punkten für zwei aufeinanderfolgende Einstellungen mit der Abstandsdifferenz $d = 12{,}5$ cm fest. Die Wellenlänge des durchgelassenen Lichtes sei $\lambda = 600$ nm. Berechnen Sie den Winkelabstand $\varepsilon$ der beiden Punkte.

A 4.1.5. Drücken Sie das Auflösungsvermögen durch den Wegunterschied $L$ der äußersten miteinander interferierenden Strahlen aus.

A 4.1.6. Ein Spektralapparat soll für das Frequenzgebiet $6 \cdot 10^{14}$ Hz Frequenzunterschiede von $3 \cdot 10^{10}$ Hz trennen. Wieviel Striche muß ein Gitter für die Auflösung in zweiter Ordnung enthalten?

A 4.1.7. Welche Wellenlängendifferenz kann ein Gitter mit 2000 Strichen bei der Wellenlänge 600 nm in dritter Ordnung trennen?

A 4.1.8. **Stufengitter.** Ein Bündel paralleler Strahlen durchsetzt die genau gleich dicken, abgestuften Glasplatten nach Bild 4.1.10. Es werden 40 Strahlen miteinander zur Interferenz gebracht. Die Dicke einer der planparallelen Platten sei $d = 0{,}1$ mm. $n$ habe den Wert 1,520. Die Vakuumwellenlänge des Lichtes betrage 600 nm. Berechnen Sie das Auflösungsvermögen des Gitters und die beiden genauen Werte der Wellenlänge um 600 nm, die bei senkrechtem Einfall optimale Verstärkung ergeben.

A 4.1.9. Welche Basislänge muß ein gleichschenkliges Prisma mit dem Öffnungswinkel $2\psi = 42°$ haben, wenn die Änderung der Brechzahl mit der Wellenlänge $4{,}2 \times 10^5\ \mathrm{m}^{-1}$ beträgt und das spektrale Auflösungsvermögen $10^5$ erreichen soll?

A 4.1.10. Unter welchem Beugungswinkel $\vartheta$ tritt am Gitter mit dem Spaltabstand $d = 2{,}5$ µm für senkrecht einfallendes Licht der Wellenlänge 589 nm im Vakuum das Beugungsmaximum vierter Ordnung auf?

A 4.1.11. Wie groß ist bei senkrechtem Einfall maximal das Auflösungsvermögen eines Gitters aus 25000 Strichen mit dem Abstand $d = 1{,}5\ \mu\text{m}$ für die Wellenlänge 600 nm?

A 4.1.12. Zwischen welchen Werten schwankt die Intensität des durchgehenden Lichtes bei einer planparallelen Platte mit $p = 10$ Strahlen auf jeder Seite, wenn die Amplitude eines Strahles gegenüber dem benachbarten vorhergehenden um den Faktor $r = 0{,}1$ geschwächt wird? Die Dicke der Platte sei groß gegen die Wellenlänge.

A 4.1.13. Wie groß ist das spektrale Auflösungsvermögen einer Glasplatte von 4 cm Dicke, wenn 10 Strahlen zur Interferenz kommen, die Brechzahl $n = 1{,}54$ ist, die Wellenlänge 589 nm beträgt und das Licht unter 30° auf die Glasplatte auftrifft?

A 4.1.14. Beim **Interferenzspektrographen von Lummer-Gehrke** erzeugt man ein Bündel paralleler Strahlen wie beim FABRY-PEROT-Interferometer durch hin- und hergehende Reflexionen. Sie erfolgen jedoch in einer Glasplatte gegen Luft. Das Licht fällt über ein aufgesetztes Prisma ein. Der Winkel bei den Reflexionen in der Glasplatte liegt knapp unterhalb des Grenzwinkels der Totalreflexion, so daß die einzelne Brechung nach außen das Licht in der Glaspatte nur wenig schwächt. Das erzeugte parallele Licht wird durch ein auf Unendlich gestelltes Fernrohr beobachtet.
Die Anzahl der interferierenden Strahlen sei $p = 65$. Es sei $n = 1{,}71$, $\lambda_0 = 540$ nm. Wie groß sind die Ordnung der Interferenz und das Auflösungsvermögen?

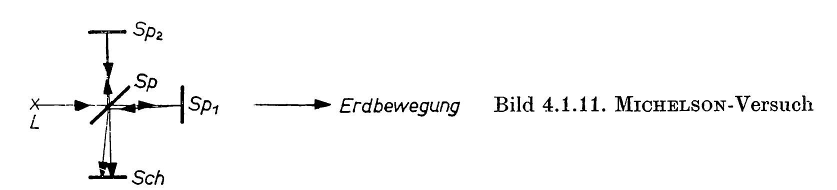



Bild 4.1.11. MICHELSON-Versuch

A 4.1.15. Zur Längenmessung mit dem MICHELSON-Interferometer stellt man den einen der beiden Spiegel $Sp_1$ oder $Sp_2$ etwas schief. Betrachtet man einen Interferenzstreifen in der Mitte des Gesichtsfeldes und verschiebt den gekippten Spiegel in Strahlrichtung, so wandert der Streifen über das Gesichtsfeld hinweg. Um welche Strecke $\Delta l$ wurde der Spiegel verschoben, wenn anstelle des ursprünglichen Helligkeitsminimums das benachbarte Maximum erscheint?

A 4.1.16. Die klassische Physik nahm als Trägermedium des Lichtes hypothetisch Lichtäther an. Bei der Bewegung der Erde um die Sonne ($v = 29\ \text{km s}^{-1}$) müßte im MICHELSON-Interferometer für die in der West-Ost-Richtung erfolgende hin- und hergehende Lichtausbreitung eine Zeitdifferenz gegen die in der Nord-Süd-Richtung festzustellen sein (vgl. Bild 4.1.11). Berechnen Sie diese für ein MICHELSON-Interferometer mit dem Abstand $l = 30$ m zwischen halbdurchlässigem Spiegel Sp und vollständig versilbertem Planspiegel $Sp_1$ bzw. $Sp_2$. Berechnen Sie die Anzahl der Interferenzstreifen, denen diese Zeitdifferenz entspricht. Die Wellenlänge sei 600 nm.

A 4.1.17. Beim FRESNELschen Spiegelversuch falle einfarbiges Licht von einem Spalt der Breite $D$, der von einer Lichtquelle inkohärent beleuchtet werde, auf die beiden schwach geneigten Spiegel, wodurch zwei sekundäre Lichtquellen der Breite $D$ erzeugt werden. Stellen Sie durch Integration über die gesamte Spaltbreite eine Formel für die Beleuchtung des Auffangschirmes unter der Voraussetzung kleiner Neigungswinkel $\vartheta \ll 1$ auf.

A 4.1.18. Welche Breite muß beim FRESNELschen Spiegelversuch der Spalt haben, um ein Kontrastminimum zu erzeugen? Führen Sie die Rechnung für Licht der Wellenlänge 600 nm durch, wenn die Spiegel unter $\vartheta = 1'$ gegeneinander geneigt sind.

A 4.1.19. Zur Messung des Durchmessers eines Fixsternes läßt man dessen Licht auf einen Doppelspalt fallen und verändert den Abstand der Spalte bis zum Verschwinden der Interferenzstreifen erster Ordnung. Welchen Abstand müssen die Spalte bei einem Fixstern mit dem Durchmesser $D = 10^6$ km haben, der sich in der Entfernung $A = 10$ ly (Lichtjahre) befindet, wenn Licht der Wellenlänge 400 nm ausgeblendet wird?

A 4.1.20. Die Sonne hat den Durchmesser $D = 1{,}4 \cdot 10^6$ km und den Abstand $1{,}5 \cdot 10^8$ km. Welcher Spaltabstand ergibt sich bei der Beobachtung durch einen Doppelspalt beim Verschwinden der Interferenzstreifen erster Ordnung ($\lambda = 600$ nm)? Welchem Öffnungswinkel entspricht das?

A 4.1.21. Das Licht eines $5 \cdot 10^{18}$ m entfernten Fixsternes erzeuge Interferenzstreifen, die für die folgenden Abstände $d$ der beiden Spalte übereinanderliegen: $d = 4{,}247$ m, 2,123 m, 1,415 m. Berechnen Sie den Öffnungswinkel $2\vartheta$, unter dem der Fixstern erscheint, und bestimmen Sie seinen Durchmesser. Die Wellenlänge des Lichtes betrage 569 nm.

A 4.1.22. Stellen Sie nach der Theorie des Fresnelschen Spiegelversuches die Kohärenzbedingung auf.

## 4.2. Beugung nach dem Huygensschen und dem Kirchhoff-Huygensschen Prinzip



### Einführung

*Kirchhoff-Huygenssches Prinzip*

Hindernisse im Strahlengang, z. B. eine Blende, ein Spalt oder ein Gitter, beeinflussen die Ausbreitung des Lichtes und führen zu dessen Beugung. Die Berechnung von Beugungsvorgängen erfordert die Lösung der **Wellengleichung**

$$\triangle\psi - \frac{n^2}{c^2}\frac{\partial^2\psi}{\partial t^2} = 0 \tag{1}$$

im Zusammenhang mit den vorliegenden Randbedingungen.
Werden zeitlich periodische Vorgänge vorausgesetzt, so erhält man daraus die **zeitfreie Wellengleichung**

$$\triangle\psi + k^2\psi = 0\,. \tag{2}$$

Darin bedeutet $k$ die Wellenzahl. $\psi$ charakterisiert eine beliebige elektrische oder magnetische Komponente des Strahlungsfeldes. Für zwei stetige Lösungsfunktionen $\psi$ und $\psi_0$ der Gleichung (2) besteht mach dem **Greenschen Satz** (vgl. A 4.2.1.) die Beziehung

$$\oint_A \left(\psi\,\frac{\partial\psi_0}{\partial n} - \psi_0\frac{\partial\psi}{\partial n}\right)\mathrm{d}A = \int_V (\psi\,\triangle\psi_0 - \psi_0\,\triangle\psi)\,\mathrm{d}V\,. \tag{3}$$

Darin kennzeichnet $A$ die Begrenzungsfläche des Integrationsgebietes $V$. Da $\psi$ und $\psi_0$ die zeitfreie Wellengleichung (2) befriedigen, folgt aus der rechten Seite der Gleichung (3)

$$\int_V (\psi\,\triangle\psi_0 - \psi_0\,\triangle\psi)\,\mathrm{d}V = -\int_V k^2(\psi\psi_0 - \psi_0\psi)\,\mathrm{d}V = 0\,. \tag{4}$$

Damit ergibt sich auf der linken Seite der Gleichung (3)

$$\oint_A \left(\psi \frac{\partial \psi_0}{\partial n} - \psi_0 \frac{\partial \psi}{\partial n}\right) \mathrm{d}A = 0. \tag{5}$$

Schreibt man die Oberflächenelemente als Vektoren $\mathrm{d}\boldsymbol{A}$, deren Richtung mit der Richtung der nach außen weisenden Flächennormalen übereinstimmt, so kann man (5) in der Form

$$\int_A (\psi \operatorname{grad} \psi_0 - \psi_0 \operatorname{grad} \psi) \cdot \mathrm{d}\boldsymbol{A} = 0 \tag{6}$$

schreiben. Im folgenden stellt $\psi$ die Lösungsfunktion eines vorgegebenen Beugungsproblems dar. $\psi_0$ bezeichnet eine von einem herausgegriffenen Punkt $P$ ausgehende Kugelwelle

$$\psi_0 = \frac{\mathrm{e}^{-ikr}}{r}, \tag{7}$$

ist somit ebenfalls eine Lösungsfunktion der Gleichung (2). $r$ gibt den Abstand zwischen einem Punkt $P_0$ auf $A$ und dem Ursprungspunkt $P$ der Kugelwelle an. Die Amplitude der Kugelwelle wächst im Ursprungspunkt $P$, d. h. für $r = 0$, über alle Grenzen.

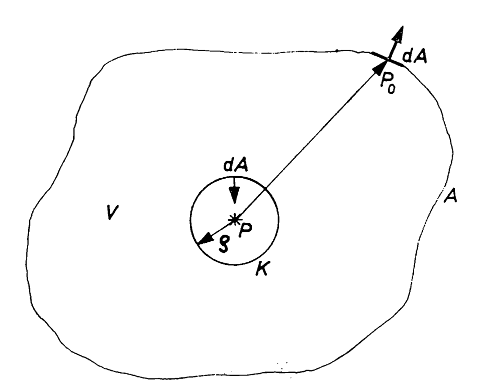



Bild 4.2.1. Zur Anwendung des GREENschen Satzes

Da der GREENsche Satz stetige Funktionen voraussetzt, muß der Ursprungspunkt durch eine kleine Kugel mit dem Radius $\varrho$ und der Oberfläche $K$ ausgeschlossen werden (vgl. Bild 4.2.1). Um diese vergrößert sich die Begrenzungsfläche. Man erhält aus (6)

$$\oint_A \left(\psi \operatorname{grad} \frac{\mathrm{e}^{-ikr}}{r} - \frac{\mathrm{e}^{-ikr}}{r} \operatorname{grad} \psi\right) \cdot \mathrm{d}\boldsymbol{A}$$

$$+ \oint_K \left(\psi \operatorname{grad} \frac{\mathrm{e}^{-ikr}}{r} - \frac{\mathrm{e}^{-ikr}}{r} \operatorname{grad} \psi\right) \cdot \mathrm{d}\boldsymbol{A} = 0. \tag{8}$$

Auf der Oberfläche der Kugel $K$ gilt in Kugelkoordinaten $r$, $\vartheta$, $\varphi$

$$\mathrm{d}\boldsymbol{A} = -\frac{\boldsymbol{r}}{r}\, r^2 \sin\vartheta \,\mathrm{d}\vartheta\,\mathrm{d}\varphi. \tag{9}$$

Ferner besteht die Beziehung

$$\operatorname{grad}\frac{\mathrm{e}^{-ikr}}{r} = \frac{\boldsymbol{r}}{r}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r}\frac{\mathrm{e}^{-ikr}}{r} = -\frac{\boldsymbol{r}}{r}\left(\frac{1}{r^2}+\frac{ik}{r}\right)\mathrm{e}^{-ikr}. \tag{10}$$

Im Grenzfall einer verschwindend kleinen Kugel $K$ liefert im Integral über $K$ nur der Summand mit dem Koeffizienten $\frac{1}{r^2}$ einen Beitrag. Es folgt

$$\lim_{\varrho\to 0}\int_K \left(\psi \operatorname{grad}\frac{\mathrm{e}^{-ikr}}{r} - \frac{\mathrm{e}^{-ikr}}{r}\operatorname{grad}\psi\right)\mathrm{d}\boldsymbol{A}$$

$$= \psi(P)\int_K \operatorname{grad}\frac{\mathrm{e}^{-ikr}}{r}\,\mathrm{d}\boldsymbol{A} = \psi(P)\int_0^{2\pi}\int_0^{\pi}\sin\vartheta\,\mathrm{d}\vartheta\,\mathrm{d}\varphi = \psi(P)\,4\pi. \tag{11}$$

Darin gibt $\psi(P)$ den Wert der Lösungsfunktion $\psi$ in einem beliebigen Punkt $P$ an, der im folgenden als Beobachtungspunkt bezeichnet wird.
Man erhält damit aus (8) die von Kirchhoff abgeleitete Formel der Beugungstheorie

$$\psi(P) = \frac{1}{4\pi}\oint_A \left(\frac{\mathrm{e}^{-ikr_{P_0P}}}{r_{P_0P}}\operatorname{grad}\psi - \psi\operatorname{grad}\frac{\mathrm{e}^{-ikr_{P_0P}}}{r_{P_0P}}\right)\mathrm{d}\boldsymbol{A}. \tag{12}$$

Sie gestattet, die Feldstärke des Lichtfeldes in einem beliebigen Punkt $P$ des Gebietes $V$ durch Integration über dessen Begrenzung $A$ zu berechnen. Die Feldstärke des Lichtfeldes ist hiernach überall in $V$ festgelegt, wenn sie auf der äußeren Begrenzung $A$ bestimmt ist.
Bei einem undurchlässigen Schirm mit einer Öffnung müßten zur Berechnung der Lichtintensität in einem Punkt $P$ hinter dem Schirm nach (12) $\psi$ und grad $\psi$ nicht nur in der Öffnung, sondern in allen Punkten auf der der Lichtquelle abgewandten Seite des Schirmes bekannt sein. Das ist im allgemeinen nicht der Fall.
Nach Kirchhoff rechnet man daher genähert und setzt auf der Oberfläche des Schirmes $\psi$ und grad $\psi$ gleich Null, während in allen Punkten der Öffnung für $\psi$ und grad $\psi$ die Werte angenommen werden, die ohne Schirm dort vorliegen würden.
Dieses Verfahren liefert im allgemeinen mit dem Experiment gut übereinstimmende Ergebnisse, ist jedoch mathematisch nicht widerspruchsfrei. Ein längs eines endlichen Kurvenstücks $s$ zusammen mit seiner normalen Ableitung verschwindendes zweidimensionales Potential müßte nach den Grundgesetzen der Funktionentheorie identisch in der gesamten zweidimensionalen Variablenebene verschwinden. Die Kirchhoffschen Annahmen haben daher ebenso wie die Ergebnisse der hierauf begründeten Rechnung nur Näherungscharakter.

**Beispiel 4.2.1. Beugung bei einer punktförmigen Strahlungsquelle**

Die punktförmige Lichtquelle $Q$ strahle eine Kugelwelle aus, von der ein Schirm mit der kleinen Öffnung $\bar{A}$ getroffen wird. Der von $Q$ bis zu einem Punkt $P_0$ der Spaltöffnung gezogene Vektor werde mit

$$\boldsymbol{r}' = \boldsymbol{r}_{QP_0}$$

bezeichnet (vgl. Bild 4.2.2). Es soll das Feld in einem Punkt $P$ hinter dem Schirm bestimmt werden. Der Vektor von $P$ nach $P_0$ sei

$$\boldsymbol{r} = \boldsymbol{r}_{PP_0}.$$

$\boldsymbol{n}$ gebe die aus dem Beobachtungsgebiet herausweisende Normale der Schirmöffnung an. Es gelten die Beziehungen

$$\boldsymbol{r} \cdot \mathrm{d}\boldsymbol{A} = r \cos(\boldsymbol{n}, \boldsymbol{r})\, \mathrm{d}A, \qquad \boldsymbol{r}' \cdot \mathrm{d}\boldsymbol{A} = r' \cos(\boldsymbol{n}, \boldsymbol{r}')\, \mathrm{d}A.$$

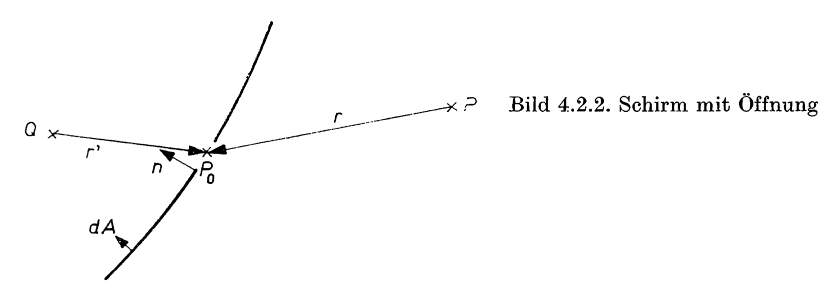



Bild 4.2.2. Schirm mit Öffnung

Entsprechend den KIRCHHOFFschen Annahmen ist in der Schirmöffnung

$$\psi \sim \mathrm{e}^{-\mathrm{i}kr'} \cdot \frac{1}{r'} \tag{13}$$

zu setzen. Damit ergibt sich aus (12) unter Berücksichtigung von (10)

$$\psi(P) = \frac{1}{4\pi} \int\limits_{\bar{A}} \frac{\mathrm{e}^{-\mathrm{i}k(r+r')}}{rr'} \left[\left(\frac{1}{r} + \mathrm{i}k\right) \cos(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{n}) - \left(\frac{1}{r'} + \mathrm{i}k\right) \cos(\boldsymbol{r}', \boldsymbol{n})\right] \mathrm{d}A. \tag{14}$$

Sind die Abstände $r$ und $r'$ groß gegen $\lambda$, so können die Summanden $\frac{1}{r}$ und $\frac{1}{r'}$ vernachlässigt werden. Damit erhält man

$$\psi(P) = \frac{\mathrm{i}k}{4\pi} \int\limits_{\bar{A}} \frac{\mathrm{e}^{-\mathrm{i}k(r+r')}}{rr'} [\cos(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{n}) - \cos(\boldsymbol{r}', \boldsymbol{n})]\, \mathrm{d}A. \tag{15}$$

$\cos(\boldsymbol{r}', \boldsymbol{n})$ und $\cos(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{n})$ weisen auf das **Lambertsche Gesetz** der Flächenhelligkeit für die auf das Spaltgebiet einfallende und die von ihm ausgehende Strahlung hin.

**Beispiel 4.2.2. Richtungsfaktoren**

Ist der Schirm von der Lichtquelle $Q$ hinreichend weit entfernt, so kann man mit einem Bündel parallel einfallender Strahlen und daher mit

$$\cos(\boldsymbol{r}', \boldsymbol{n}) = \text{const}$$

rechnen. Bei senkrecht auf die Öffnung fallenden Strahlen ist

$$\cos(\boldsymbol{r}', \boldsymbol{n}) = -1.$$

Befindet sich auch $P$ weit von der Schirmöffnung entfernt, so können im Beobachtungsgebiet ebenfalls parallele Strahlen zugrunde gelegt werden. Der Richtungsfaktor wird damit eine konstante Größe

$$\cos(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{n}) - \cos(\boldsymbol{r}', \boldsymbol{n}) = \text{const}$$

und kann vor das Integral gesetzt werden. Desgleichen können im Nenner die Abstände $r$ und $r'$ als konstant behandelt werden. Es folgt somit

$$\psi(P) = \int_{\bar{A}} \mathrm{e}^{-\mathrm{i}k(r+r')}\,\mathrm{d}A, \tag{16}$$

d. h., unter dem Integral ist nur noch die Phasendifferenz zwischen den einzelnen Strahlen der Öffnung zu berücksichtigen. Durch Übergang von der Integration zur Summierung kann die Beugungsintensität für beliebige Blenden numerisch berechnet werden. Nach (16) kann man z. B.

$$\psi(P) \sim \sum_{\nu} \mathrm{e}^{-\mathrm{i}k(r_\nu+r_\nu')}\,\Delta A_\nu \tag{16a}$$

schreiben, wobei

$$\sum_{\nu} \Delta A_\nu = \bar{A} \tag{16b}$$

gilt.

**Beispiel 4.2.3. Beugung am Rechteck**

$P$ und $Q$ seien weit von der Spaltöffnung $\bar{A}$ entfernt. Diese sei ein Rechteck mit den Seitenlängen $2a$ und $2b$.
Für die Integration werden die Variablen $x_0$, $y_0$, $z_0$ eingeführt. Das Rechteck liege in der Ebene $z_0 = 0$. $x_0 = 0$, $y_0 = 0$ kennzeichnen die Koordinaten des Mittelpunktes $O$, $x_0 = \pm a$, $y_0 = \pm b$ die der Eckpunkte (vgl. Bild 4.2.3). Das Flächendifferential kann durch

$$\mathrm{d}A = \mathrm{d}x_0\,\mathrm{d}y_0$$

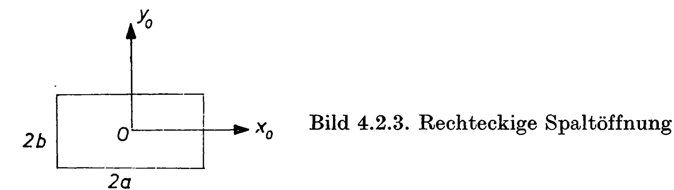



Bild 4.2.3. Rechteckige Spaltöffnung

ersetzt werden. Sind $\xi$, $\eta$, $\zeta$ die Koordinaten der Lichtquelle $Q$ und bezeichnet $R'$ den Abstand der Punkte $Q$ und $O$, so erhält man

$$r' = r_{QP_0} = \sqrt{(\xi - x_0)^2 + (\eta - y_0)^2 + \zeta^2} = \sqrt{R'^2 - 2(x_0\xi + y_0\eta) + (x_0 + y_0)^2}$$
$$= R' - \frac{\xi}{R'}\,x_0 - \frac{\eta}{R'}\,y_0.$$

Die Richtungscosinus des einfallenden Strahles gegen die $x_0$-, $y_0$-, $z_0$-Achse seien mit

$$\cos\alpha_1 = -\frac{\xi}{R'}, \qquad \cos\alpha_2 = -\frac{\eta}{R'}, \qquad \cos\alpha_3 = -\frac{\zeta}{R'} \tag{17}$$

bezeichnet. Damit folgt

$$r' = R' + x_0 \cos \alpha_1 + y_0 \cos \alpha_2. \tag{18}$$

Sind $x$, $y$, $z$ die Koordinaten des Beobachtungspunktes $P$ und definiert man $R = r_{P0}$ nebst

$$\cos \beta_1 = \frac{x}{R}, \qquad \cos \beta_2 = \frac{y}{R}, \qquad \cos \beta_3 = \frac{z}{R}, \tag{19}$$

so erhält man analog (18)

$$r = R - x_0 \cos \beta_1 - y_0 \cos \beta_2. \tag{20}$$

Damit folgt aus (16)

$$\psi \sim \int \mathrm{e}^{-\mathrm{i}k\Phi} \, \mathrm{d}x_0 \, \mathrm{d}y_0 \tag{21}$$

mit

$$\Phi = x_0(\cos \alpha_1 - \cos \beta_1) + y_0(\cos \alpha_2 - \cos \beta_2). \tag{22}$$

(21) kann in zwei einfache Integrale zerlegt werden:

$$\psi \sim \int_{-a}^{+a} \mathrm{e}^{-\mathrm{i}k(\cos\alpha_1 - \cos\beta_1)x_0} \, \mathrm{d}x_0 \int_{-b}^{+b} \mathrm{e}^{-\mathrm{i}k(\cos\alpha_2 - \cos\beta_2)y_0} \, \mathrm{d}y_0. \tag{23}$$

Ihre Auswertung führt auf

$$\psi \sim \frac{\sin \gamma_1}{\gamma_1} \frac{\sin \gamma_2}{\gamma_2} \tag{24}$$

mit

$$\gamma_1 = k(\cos \alpha_1 - \cos \beta_1) \, a, \qquad \gamma_2 = k(\cos \alpha_2 - \cos \beta_2) \, b. \tag{25}$$

Für die Intensität der Strahlung erhält man

$$\psi \sim \frac{\sin^2 \gamma_1}{{\gamma_1}^2} \frac{\sin^2 \gamma_2}{{\gamma_2}^2}. \tag{26}$$

Vollständige Auslöschung der Strahlung liegt somit für

$$\gamma_1 = m\pi \quad (m = 1, 2, \ldots), \qquad \gamma_2 = n\pi \quad (n = 1, 2, \ldots) \tag{26a}$$

vor (vgl. 4.2.1.).

*Huygenssches Prinzip*

Die praktische Berechnung von Beugungseffekten erfolgt in der Regel mit Hilfe des HUYGENSschen Prinzips. Es lautet: Die auf eine Öffnung auffallende Lichtwelle pflanzt sich so fort, als ob von jedem ihrer Elemente d$A$ eine Kugelwelle ausgehen würde, deren Amplitude und Phase durch die einfallende Welle bestimmt wird (vgl. Bild 4.2.4). Ist eine Wellenfläche vorgegeben, so kann jeder ihrer Punkte als

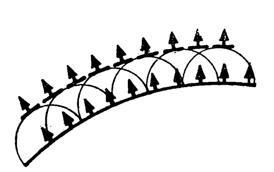


Bild 4.2.4. Konstruktion einer Wellenfront nach dem HUYGENSschen Prinzip

selbständiges Erregungszentrum einer Kugelwelle betrachtet werden. Die fortgeschrittene Wellenfläche ergibt sich als Einhüllende dieser Kugelwellen.
In den Bildern 4.2.5 bis 4.2.7 sind die **Ausbreitung** einer ebenen Welle im Raum, **Reflexion** und **Brechung** nach dem HUYGENSschen Prinzip dargestellt.
Das HUYGENSsche Prinzip stellt eine Näherung dar, die um so genauer gilt, je kleiner die Wellenlänge der Strahlung ist.

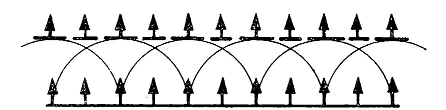


Bild 4.2.5. Ausbreitung einer ebenen Welle nach dem HUYGENSschen Prinzip

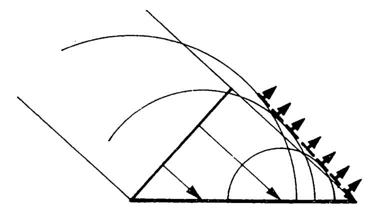


Bild 4.2.6. Reflexion nach dem HUYGENSschen Prinzip

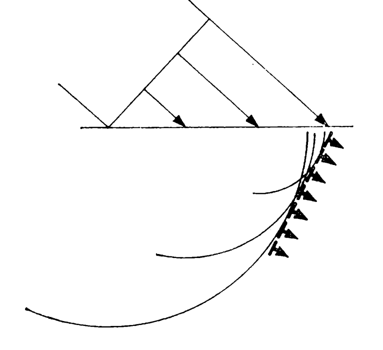


Bild 4.2.7. Brechung nach dem HUYGENSschen Prinzip

*Ableitung des Huygensschen Prinzips mit Hilfe der Greenschen Funktion*

Der mathematische Widerspruch im KIRCHHOFF-HUYGENSschen Prinzip läßt sich vermeiden, wenn man in (3) für $\psi_0$ anstelle der Kugelfunktion (7) die **Greensche Funktion** $G = G(P_0, P)$ einsetzt. $P_0(x_0, y_0, z_0)$ und $P(x, y, z)$ sind zunächst zwei beliebige Punkte im Raum. $G$ ist durch die folgenden Gleichungen festgelegt:

$$\Delta G + k^2 G = 0 \quad \text{(bezüglich der Koordinaten von } P_0 \text{ und } P\text{)}, \tag{27a}$$

$$G = 0 \quad \text{für } P_0 \text{ auf der Begrenzungsfläche } A, \tag{27b}$$

$$G \to \psi \quad \text{für } P_0 \to P, \tag{27c}$$

$$r\left(\frac{\partial G}{\partial n} - ikG\right) \to 0 \quad \text{für } r \to \infty. \tag{27d}$$

Darin ist $r = r_{PP_0}$. $\boldsymbol{n}$ gibt die nach außen weisende Normale der Begrenzung bzw. des Schirmes an.
(27a) kennzeichnet die zeitfreie Wellengleichung. Danach gilt für $G$ der GREENsche Satz (3). (27b) definiert die Randbedingung für $G$. (27c) besagt, daß $G$ ebenso wie $\psi$ im Beobachtungspunkt $P$ singulär wird. (27d) heißt **Ausstrahlungsbedingung** und gilt ebenso für $\psi$.

Für den ebenen Schirm nach Bild 4.2.8 läßt sich die GREENsche Funktion einfach konstruieren, wenn man in bezug auf die Schirmebene zu $P$ den außerhalb des Beobachtungsgebietes liegenden Spiegelpunkt $P_S$ ($x_S$, $y_S$, $z_S$) einführt. Definiert man

$$G = \frac{e^{ikr}}{r} - \frac{e^{ikr_S}}{r_S}, \tag{28}$$

wobei

$$\left.\begin{aligned} r &= [(x_0 - x)^2 + (y_0 - y)^2 + (z_0 - z)^2]^{1/2}, \\ r_S &= [(x_0 - x_S)^2 + (y_0 - y_S)^2 + (z_0 - z_S)^2]^{1/2} \end{aligned}\right\} \tag{29}$$

ist, so erfüllt diese Funktion $G$ sämtliche nach (27a) bis (27d) gestellten Bedingungen, wie man sich durch Nachrechnen überzeugen kann.

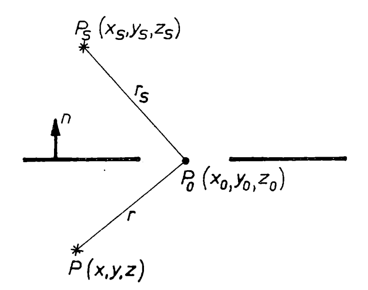



Bild 4.2.8. Konstruktion der GREENschen Funktion

Auf Grund der Randbedingung (27b) läßt sich der GREENsche Satz (3) vereinfachen. Bei der Integration über den Schirm $A$ verschwindet der zweite Summand $\psi_0$ grad $\psi$ bzw. $G$ grad $\psi$. Die Integration über die Kugel $K$ bleibt unverändert. Man erhält damit anstelle von (12)

$$\psi(P) = -\frac{1}{4\pi} \int_A \psi \operatorname{grad} G \cdot dA = -\frac{1}{4\pi} \int_A \psi \frac{\partial G}{\partial n} dA. \tag{30}$$

Wählt man die $z$-Achse antiparallel zur Flächennormalen $\boldsymbol{n}$ im Punkte $P_0$, d. h. in das Beobachtungsgebiet hineinweisend, so ergibt sich

$$\frac{\partial G}{\partial n} = -\frac{\partial G}{\partial z} = -\frac{d}{dr} \frac{e^{-ikr}}{r} \frac{dr}{dz} + \frac{d}{dr_S} \frac{e^{-ikr_S}}{r_S} \frac{dr_S}{dz}. \tag{31}$$

Für den auf dem Schirm liegenden Punkt $P_0$ ist

$$r = r_S, \quad \frac{dr}{dz} = -\frac{dr_S}{dz} = \cos(\boldsymbol{n}, \boldsymbol{r}). \tag{32}$$

Damit folgt

$$\frac{\partial G}{\partial n} = -2 \cos(\boldsymbol{n}, \boldsymbol{r}) \frac{d}{dr} \frac{e^{-ikr}}{r}. \tag{33}$$

Durch Einsetzen in (30) erhält man in Verbindung mit (10) unter Vernachlässigung der Glieder zweiter Ordnung

$$\boxed{\psi(P) = -\frac{\mathrm{i}}{\lambda} \int_A \psi \frac{\mathrm{e}^{-\mathrm{i}kr}}{r} \cos(\boldsymbol{n}, \boldsymbol{r}) \, \mathrm{d}A}\,. \tag{34}$$

Diese Gleichung drückt das HUYGENSsche Prinzip aus. Durch den Faktor cos ($\boldsymbol{n}, \boldsymbol{r}$) kommt das LAMBERTsche Gesetz der Flächenhelligkeit zum Ausdruck.

*Fresnelsche und Fraunhofersche Beugung*

Sind die Lichtquelle $Q$ und der Beobachtungspunkt $P$ unendlich weit von der beugenden Öffnung entfernt, so wird diese von parallelen Strahlen durchsetzt, die parallel auf das Beobachtungselement fallen. Die hierbei beobachtete Beugungserscheinung

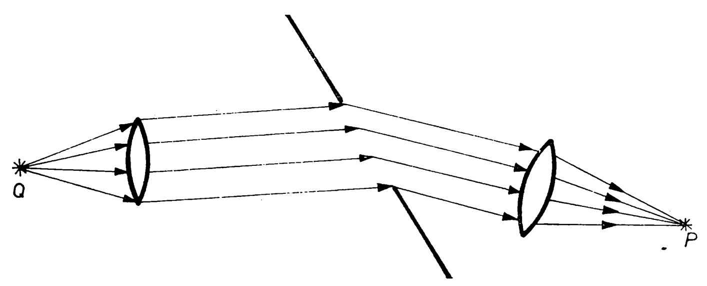



Bild 4.2.9. FRAUNHOFERsche Beugung

heißt FRAUNHOFERsche Beugung (vgl. Bild 4.2.9). Sie entspricht dem Fall, daß sich die Lichtquelle im Brennpunkt einer Sammellinse befindet und die Beugungserscheinung mit einem auf Unendlich gestellten Fernrohr beobachtet wird, d. h., der Beobachtungspunkt liegt in der Brennebene des Fernrohrobjektivs.
Befinden sich dagegen die Lichtquelle $Q$ oder der Beobachtungspunkt $P$ bzw. beide im Endlichen, so heißt die beobachtete Beugungserscheinung FRESNELsche Beugung.

## P Probleme

### 4.2.1. Beugung am Spalt nach dem Huygensschen Prinzip

Auf einen Spalt der Breite $a = 0{,}005$ mm fällt unter dem Einfallswinkel $\alpha = 30°$ paralleles Licht der Wellenlänge 650 nm. Nach der Beugung wird es von einem weit entfernten Schirm aufgefangen. Untersuchen Sie den Intensitätsverlauf und bestimmen Sie die Bereiche vollständiger Dunkelheit. Welches Verhältnis ergibt sich zwischen den Maxima nullter und erster Ordnung?

**Lösung:**

Da der Auffangschirm weit entfernt ist, können Bündel parallel ausfallender Strahlen betrachtet werden. Der Richtungsfaktor cos $(\boldsymbol{n}, \boldsymbol{r})$ in (4.2./34) ist konstant. Im Nenner kann mit einem konstanten Abstand $r$ gerechnet werden, über den ebenfalls nicht integriert wird. Dagegen sind die Phasenunterschiede zu berücksichtigen. Bei der einfallenden Welle werden sie durch

$$\psi \sim e^{-ikr'}$$

erfaßt. Nach (4.2./34) folgt daher

$$\psi(P) \sim \int \psi \, e^{-ikr} \, dA \sim \int e^{-ik(r+r')} \, dA. \tag{1a}$$

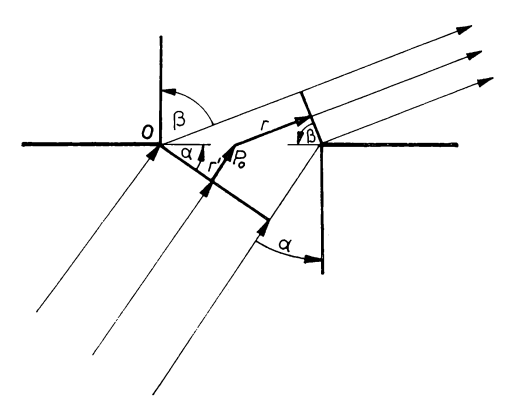



Bild 4.2.10. Beugung am Spalt

Für den durch einen Punkt $P_0$ in der Spaltöffnung gehenden Strahl mit dem Abstand $\xi$ vom Randstrahl durch $O$ (vgl. Bild 4.2.10) beträgt die Phasendifferenz

$$\frac{\xi}{2\pi\lambda} (\sin\alpha - \sin\beta).$$

Durch Integration über die gesamte Spaltöffnung folgt daher

$$\psi(P) \sim \int\limits_0^a e^{-i\frac{\xi}{2\pi\lambda}(\sin\alpha - \sin\beta)} \, d\xi. \tag{1}$$

Durch Auswertung dieses Integrals ergibt sich

$$\psi(P) \sim \frac{1}{\sin\alpha - \sin\beta} \left( e^{-2\pi i \frac{a}{\lambda}(\sin\alpha - \sin\beta)} - 1 \right) \tag{2}$$

Für die Intensität erhält man

$$\psi\psi^* \sim \frac{\sin^2\gamma}{\gamma^2} \tag{3}$$

mit

$$\gamma = \frac{\pi a}{\lambda} (\sin\alpha - \sin\beta). \tag{4}$$

Der Verlauf der Intensität $\psi\psi^*$ nach (3) ist in Bild 4.2.11 dargestellt. Nullstellen treten auf, wenn $\gamma$ positive oder negative ganzzahlige Vielfache von $\pi$ annimmt. Sie sind also durch

$$a(\sin\alpha - \sin\beta) = m\lambda \qquad (m = \pm 1, \pm 2, \ldots) \tag{5}$$

bestimmt und kennzeichnen die Bereiche vollständiger Auslöschung. Für $m = 0$ liegt dagegen, wie nach der L'HOSPITALschen Regel folgt, das Intensitätsmaximum nullter Ordnung vor.
Mit den vorgegebenen Daten ergibt sich nach (4) und (5) das Minimum erster Ordnung für

$$\sin\beta = \sin\alpha - \frac{\lambda}{a} = 0{,}5000 - \frac{650\,\text{nm}}{5000\,\text{nm}} = 0{,}3700,$$

d. h. für $\beta = 21°43'$, bzw. für

$$\sin\beta = \sin\alpha + \frac{\lambda}{a} = 0{,}5000 + \frac{650\,\text{nm}}{5000\,\text{nm}} = 0{,}6300,$$

d. h. für $\beta = 39°03'$.

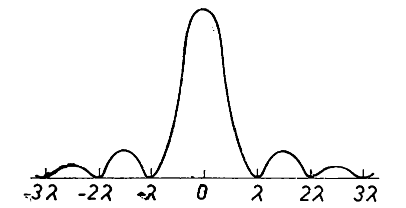



Bild 4.2.11. Intensität bei der Beugung am Spalt

Weitere Maxima treten näherungsweise für $\sin\gamma = \pm 1$, jedoch nicht für $\gamma = \pm\frac{\pi}{2}$ auf (vgl. Bild 4.2.11). Sie liegen also näherungsweise bei

$$\gamma = \left\{\begin{matrix} (2k+1)\frac{\pi}{2} & (k = 1, 2, 3, \ldots) \\ (2k'-1)\frac{\pi}{2} & (k' = -1, -2, -3, \ldots) \end{matrix}\right\}. \tag{6}$$

Als Intensitätsverhältnis zwischen den Maxima nullter und erster Ordnung erhalten wir daher genähert

$$\frac{(\psi\psi^*)_0}{(\psi\psi^*)_1} = \frac{1}{\left(\frac{2}{3\pi}\right)^2} = \frac{9\pi^2}{4} = 22{,}2.$$

## 4.2.2. Fraunhofersche Beugung am Gitter nach dem Huygensschen Prinzip

Auf ein Gitter aus $p = 2000$ Spalten falle unter dem Winkel $\alpha = 30°$ paralleles Licht der Wellenlänge $\lambda = 650$ nm. Eine Spaltöffnung habe die Breite $a = 0{,}005$ mm. Der Abstand zweier Spaltöffnungen betrage $d = 0{,}010$ nm (vgl. Bild 4.1.2).
Bestimmen Sie die Lage der Hauptmaxima erster bis vierter Ordnung auf einem unendlich weit entfernten Schirm.

**Lösung:**

Die Amplitude des elektrischen Feldes ergibt sich wie bei der Beugung am Spalt nach 4.2.1.; anstelle über den einzelnen Spalt ist jedoch über sämtliche $p$ Spalte zu integrieren. Für die unter

der Richtung $\beta$ ausgehende ebene Welle folgt daher analog (4.2.1./1) mit

$$e^{-i\frac{\xi}{2\pi\lambda}(\sin\alpha - \sin\beta)} = F:$$

$$\psi \sim \int_0^a F\,d\xi + \int_d^{d+a} F\,d\xi + \cdots + \int_{(p-1)d}^{(p+1)d+a} F\,d\xi. \tag{1}$$

Wir setzen

$$\gamma = \pi \frac{a}{\lambda} (\sin\alpha - \sin\beta), \qquad \delta = 2\pi \frac{d}{\lambda} (\sin\alpha - \sin\beta). \tag{2}$$

Durch Auswertung des Integrals in (1) erhalten wir

$$\psi \sim \frac{1}{\gamma} (-1 + e^{-2i\gamma} - e^{i\delta} + e^{-i(\delta+2\gamma)} - e^{2i\delta} + e^{-i(2\delta+2\gamma)} + \cdots)$$

$$= \frac{1}{\gamma} (e^{-i2\gamma} - 1) \sum_{\nu=0}^{p-1} e^{-i\nu\delta} = \frac{e^{-i2\gamma} - 1}{\gamma} \frac{e^{-ip\delta} - 1}{e^{-i\delta} - 1}. \tag{3}$$

Für die Intensität ergibt sich

$$\psi\psi^* = \frac{\sin^2\gamma}{\gamma^2} \frac{\sin^2\frac{p\delta}{2}}{\sin^2\frac{\delta}{2}}. \tag{4}$$

Die Intensitätsmaxima des Spaltes nach 4.2.1. werden durch die Gitterwirkung weiter unterteilt. In gleicher Weise werden die nach (4.1.2./3) sich ergebenden Intensitätsmaxima bei der Überlagerung einer großen Anzahl von Strahlen noch einmal durch die Spaltwirkung unterteilt.

Der zweite Faktor in (4) liefert **Hauptmaxima** für

$$\delta = 2h\pi \qquad (h = 0, \pm 1, \pm 2, \ldots) \tag{5a}$$

(vgl. 4.1.2./5), d. h. bei

$$d(\sin\alpha - \sin\beta) = h\lambda \qquad (h = 0, \pm 1, \pm 2, \ldots). \tag{5}$$

Dazwischen gibt es $p - 1$ wesentlich schwächere Nebenmaxima. Sie liegen zwischen den im Abstand $2\pi/p$ auf der $\delta$-Skale folgenden Stellen völliger Auslöschung.

Während $d$ nach (5) die Lage und $p$ die Schärfe der Hauptmaxima bestimmt, kann durch die Spaltbreite $a$ Einfluß auf die Intensitätsverhältnisse in den Ordnungen genommen werden.

Im vorliegenden Fall $d = 2a$ ergibt sich nach (2) für die Hauptmaxima geradzahliger Ordnung, d. h. für $h = 2h'$ ($h' = \pm 1, \pm 2, \ldots$),

$$a(\sin\alpha - \sin\beta) = h'\lambda \qquad \text{bzw.} \qquad \gamma = h'\pi. \tag{6}$$

Die Intensitätsfunktion des Spaltes liefert daher im Falle $d = 2a$ gerade für die Hauptmaxima geradzahliger Ordnung den Wert null, d. h., die geradzahligen Ordnungen fallen aus. Es treten somit nur die Hauptmaxima erster und dritter Ordnung auf. Sie sind durch

$$(\sin\beta)_{\text{I}} = \sin\alpha \mp \frac{\lambda}{d}, \qquad (\sin\beta)_{\text{III}} = \sin\alpha \mp \frac{3\lambda}{d} \tag{7}$$

bestimmt, d. h. im vorliegenden Falle durch

$$(\sin\beta)_{\mathrm{I}} = 0{,}5000 \mp 0{,}0650, \qquad (\sin\beta)_{\mathrm{III}} = 0{,}5000 \mp 3\cdot 0{,}0650.$$

Hieraus folgt

$$\beta_{\mathrm{I}} = 25^\circ 47' \quad \text{bzw.} \quad 34^\circ 24', \qquad \beta_{\mathrm{III}} = 17^\circ 45' \quad \text{bzw.} \quad 44^\circ 2'.$$

### 4.2.3. Babinetsches Prinzip

Ein dünner Draht vom Durchmesser $a = 0{,}01$ mm wird in den Strahlengang parallelen Lichtes der Wellenlänge $\lambda = 590$ nm gebracht, wodurch dieses gebeugt wird. Der Strahldurchmesser des einfallenden Lichtes sei 1 mm, also groß gegen die Wellenlänge und gegen den Drahtdurchmesser. Um das direkte Licht zu beseitigen, befindet sich auf dem Schirm eine Öffnung, die der des Strahldurchmessers entspricht (vgl. Bild 4.2.12).

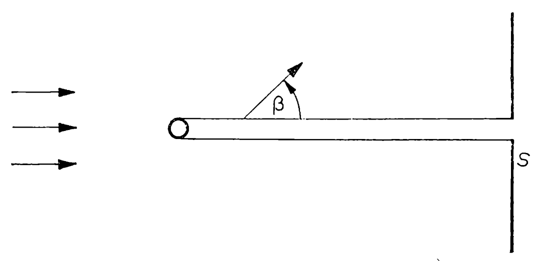



Bild 4.2.12. Zur Beugung an einem dünnen Draht. S Schirm

Untersuchen Sie das Auftreten von Beugungsmaxima auf dem Schirm. Wo wird das Beugungsminimum erster Ordnung beobachtet, wenn der Schirm vom Draht die Entfernung $l = 1$ m hat?

**Lösung:**

Wir vergleichen das Beugungsbild I einer Öffnung bzw. einer Anzahl Öffnungen in einem sonst undurchlässigen Schirm mit dem Beugungsbild II, das entsteht, wenn Öffnungen und undurchlässige Schirme vertauscht werden. Untersucht wird dabei nur das gebeugte Licht, während die im direkten Strahlengang liegenden Punkte von der Betrachtung ausgeschlossen sind. Daher wird beim Beugungsbild II weit außen, d. h. im Bild 4.2.13 außerhalb der großen Öffnung $AB$, ein Schirm $S$ vorausgesetzt.
Das Feld der im Falle I in $P$ eingehenden Strahlung ergibt sich nach (4.2./15):

$$\psi_{\mathrm{I}}(P) \sim \frac{\mathrm{i}k}{4\pi} \int\limits_{\text{Spalt I}} \frac{\mathrm{e}^{-\mathrm{i}k(r+r')}}{rr'} \left[\cos(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{n}) - \cos(\boldsymbol{r}', \boldsymbol{n})\right] \mathrm{d}A. \tag{1}$$

Ebenso erhält man für das Feld im Falle II

$$\psi_{\mathrm{II}}(P) \sim \frac{\mathrm{i}k}{4\pi} \int\limits_{\text{Spalt II}} \frac{\mathrm{e}^{-\mathrm{i}k(r+r')}}{rr'} \left[\cos(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{n}) - \cos(\boldsymbol{r}', \boldsymbol{n})\right] \mathrm{d}A. \tag{2}$$

Die Summe $\psi_{\mathrm{I}} + \psi_{\mathrm{II}}$ verschwindet, wenn die Öffnung $AB$ hinreichend groß ist und durch diese kein direktes Licht von $Q$ nach $P$ gelangen kann. Daher ist

$$\psi_{\mathrm{I}} = -\psi_{\mathrm{II}} \tag{3}$$

und somit

$$\boxed{\psi_{\mathrm{I}}^2 = \psi_{\mathrm{II}}^2 \qquad \text{BABINETsches Prinzip}}. \tag{4}$$

Außerhalb des direkten Lichtes ist das Beugungsbild identisch, wenn man Öffnungen und Schirme miteinander vertauscht.
Für das Beugungsbild eines dünnen Drahtes bedeutet das, daß man diesen durch eine gleich große Spaltöffnung ersetzen kann. Die Beugungsminima sind durch (4.2.1./5) bestimmt. Setzt man $\alpha = 0$, so erhält man das Beugungsminimum erster Ordnung für

$$\sin\beta = \pm\frac{\lambda}{a}. \tag{5}$$

Im vorliegenden Fall tritt es für

$$\sin\beta = \frac{590\cdot 10^{-9}\ \mathrm{m}}{0{,}01\cdot 10^{-3}\ \mathrm{m}} = 0{,}0590, \qquad \beta = 3°23'$$

auf. Der dünne Draht erzeugt daher auf dem 1 m entfernten Schirm einen dunkeln Ring mi dem Durchmesser

$$2R = 2l\tan\beta = 2\cdot 1{,}00\cdot 0{,}0591\ \mathrm{m} = 11{,}8\ \mathrm{cm}.$$

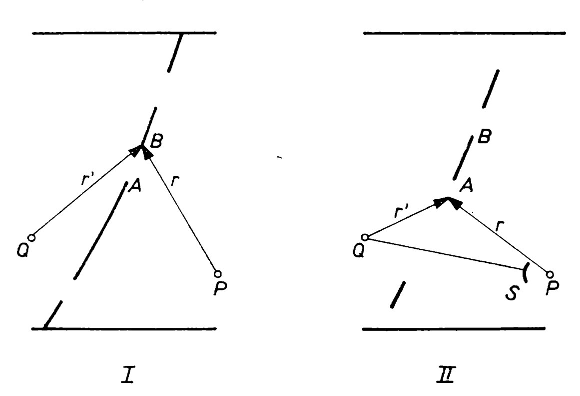



Bild 4.2.13. Zum BABINETschen Prinzip

## 4.2.4. Beugung hinter einer Kreisscheibe

Eine Kreisscheibe mit dem Durchmesser $2a = 2$ cm steht senkrecht im Strahlungsfeld eines Bündels paralleler Strahlen, die dadurch gebeugt werden. Bestimmen Sie die Intensität des Lichtes auf der Achse hinter der Kreisscheibe im Vergleich zur primären Erzeugung vor der Scheibe. Untersuchen Sie, für welchen Abstand von der Kreisscheibe die relative Beugungseffektivität 99% beträgt. Der Abstand $R$ des Beobachtungspunktes von der Kreisscheibe ist dabei als groß gegenüber der Wellenlänge des Lichtes vorauszusetzen.

**Lösung:**

Die Beugungsöffnung besteht aus dem gesamten Äußeren

$$a < x < \infty$$

der Kreisscheibe. Wir zerlegen die Öffnung in Kreisringe mit der Fläche

$$\mathrm{d}A = 2\pi x\,\mathrm{d}x.$$

Nimmt man für $Q$ eine punktförmige Lichtquelle mit der Intensität

$$B\,\frac{\mathrm{e}^{-\mathrm{i}kr'}}{r'}$$

in der Spaltöffnung an, so folgt nach dem HUYGENSschen Prinzip (4.2./34) für die Feldstärke (vgl. Bild 4.2.14)

$$\psi(P) = B \int\limits_A \frac{\mathrm{e}^{-\mathrm{i}k(r+r')}}{rr'} \cos(\boldsymbol{n}, \boldsymbol{r})\, x\, \mathrm{d}x. \tag{1}$$

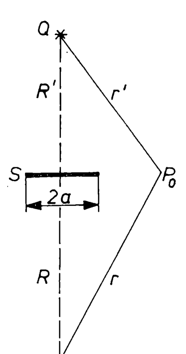



Bild 4.2.14. Zur Beugung hinter einer Kreisscheibe

Im Grenzfall parallel einfallenden Lichtes bzw. sehr großer Werte $r'$ kann diese Größe durch den Abstand $R'$ der Lichtquelle vom Schirm ersetzt werden. Ferner ist

$$r^2 = R^2 + x^2 \tag{2}$$

und daher

$$x\,\mathrm{d}x = r\,\mathrm{d}r \tag{3}$$

sowie

$$\cos(\boldsymbol{n}, \boldsymbol{r}) = \frac{R}{r}. \tag{4}$$

Damit erhalten wir aus (1)

$$\psi(P) = -\frac{\mathrm{i}}{\lambda}\, 2\pi B R\, \frac{\mathrm{e}^{-\mathrm{i}kR'}}{R'} \int\limits_{\sqrt{R^2+a^2}}^{\infty} \frac{\mathrm{e}^{-\mathrm{i}kr}}{r}\, \mathrm{d}r. \tag{5}$$

Das Integral läßt sich partiell auswerten:

$$\int \frac{\mathrm{e}^{-\mathrm{i}kr}}{r}\, \mathrm{d}r = -\left( \frac{\mathrm{i}}{k} \left[ \frac{\mathrm{e}^{-\mathrm{i}kr}}{r} \right]_{\sqrt{R^2+a^2}}^{\infty} + \int\limits_{\sqrt{R^2+a^2}}^{\infty} \frac{\mathrm{e}^{-\mathrm{i}kr}}{r^2}\, \mathrm{d}r \right). \tag{6}$$

Integriert man den zweiten Summanden erneut partiell, so ergibt sich

$$\int \frac{\mathrm{e}^{-\mathrm{i}kr}}{r^2}\, \mathrm{d}r = \frac{\mathrm{i}}{k} \left[ \left( \frac{\mathrm{e}^{-\mathrm{i}kr}}{r^2} \right) + 2 \int \frac{\mathrm{e}^{-\mathrm{i}kr}}{r^3}\, \mathrm{d}r \right]. \tag{7}$$

Dieses Verfahren kann beliebig fortgesetzt werden.

Der Koeffizient $\frac{1}{k} = \frac{\lambda}{2\pi}$ bedingt wegen der Kleinheit der Wellenlänge $\lambda$ gegenüber $R'$, daß der jeweils zweite Summand in (6) bzw. (7) gegen den ersten vernachlässigt werden kann. Berücksichtigt man, daß mit der Entfernung $r$ von der Lichtquelle auch die Dämpfung ansteigt, $k$ somit auch einen imaginären Anteil enthält, so folgt schließlich aus (5) und (6)

$$\psi(P) = B \frac{R}{R'} e^{-ikR'} \frac{e^{-ik\sqrt{R^2+a^2}}}{\sqrt{R^2 + a^2}}. \tag{8}$$

Im Vergleich zur primären Erregung

$$\psi_0 = B \frac{e^{-ikR'}}{R'} \tag{9}$$

erhält man die relative Erregung

$$\frac{\psi}{\psi_0} = \frac{R}{\sqrt{R^2 + a^2}} e^{-ik\sqrt{R^2+a^2}} \tag{10}$$

und damit die relative Intensität

$$\frac{\psi\psi^*}{\psi_0\psi_0^*} = \frac{R^2}{R^2 + a^2}. \tag{11}$$

Nur unmittelbar hinter der Kreisscheibe herrscht Dunkelheit. Mit zunehmendem Abstand verursacht die Beugung im Schattenraum eine wachsende Aufhellung. Die Intensität beträgt mehr als 99% der Primärintensität für

$$R^2 > 0{,}99(R^2 + a^2)$$

bzw.

$$R > \sqrt{99}\, a = 9{,}95a,$$

d. h. bereits 10 cm hinter der Kreisscheibe.

### 4.2.5. Beugung durch eine kreisrunde Öffnung

Eine kreisrunde Öffnung mit dem Durchmesser $2a = 2$ mm wird von parallelem Licht der Wellenlänge $\lambda = 500$ nm senkrecht angestrahlt. Untersuchen Sie die Intensität auf der Achse unmittelbar hinter sowie im großen Abstand von der Scheibe. Wie dicht liegen die Intensitätsminima unmittelbar hinter der Blendenöffnung? Welche Intensität ergibt sich in sehr großem Abstand $R \to \infty$?

**Lösung:**

Nach dem HUYGENSschen Prinzip (4.2./34) folgt analog (4.2.4./5) für einen Beobachtungspunkt $P$ im Abstand $R$

$$\psi(P) = -\frac{i}{\lambda} 2\pi B \frac{R}{R'} e^{-ikR'} \int_R^{\sqrt{R^2+a^2}} \frac{e^{-ikr}}{r} dr. \tag{1}$$

Bei der partiellen Integration kann man sich wie in 4.2.4. auf Glieder erster Ordnung beschränken und erhält

$$\psi(P) = -i \frac{BR}{R'} e^{-ikR'} \left[\frac{e^{-ikR}}{R}\right]_R^{\sqrt{R^2+a^2}}. \tag{2}$$

Für die Intensität im Verhältnis zur primären Intensität nach (4.2.4./9) ergibt sich aus (2) durch Anwendung der EULERschen Gleichung

$$\frac{\psi\psi^*}{\psi_0\psi_0^*} = \frac{a^2 + 2R^2}{a^2 + R^2} - \frac{2R}{\sqrt{a^2 + R^2}} \cos k \left(\sqrt{a^2 + R^2} - R\right). \tag{3}$$

Für das Gebiet $R \ll a$ unmittelbar hinter der Blendenöffnung geht diese Gleichung in

$$\frac{\psi\psi^*}{\psi_0\psi_0^*} = 1 - 2 \frac{R}{a} \cos k(a - R) \tag{4}$$

über. Genau im Mittelpunkt der Öffnung für $R = 0$ findet man die primäre Intensität $\psi\psi^* = \psi_0\psi_0^*$ wieder. Unmittelbar hinter der Blendenöffnung wechseln Intensitätsminima und -maxima einander ab. Die Intensität der Maxima ist gleich der Primärintensität, die der Minima angenähert gleich

$$\frac{\psi\psi^*}{\psi_0\psi_0^*} = 1 - \frac{2R}{a}. \tag{5}$$

Das Argument $k(a - R)$ der Cosinusfunktion bedeutet, daß die Minima im Abstand $\frac{\lambda}{2}$ aufeinander folgen. Die Dichte der Minima beträgt

$$\frac{2}{\lambda} = \frac{2}{500 \cdot 10^{-9}} \text{ m}^{-1} = 4 \cdot 10^6 \text{ m}^{-1}.$$

Für sehr große Abstände $R \gg a$ kann man eine Reihenentwicklung nach dem binomischen Satz vornehmen und erhält

$$\sqrt{R^2 + a^2} - R = \frac{1}{2} \frac{a^2}{R} + \cdots. \tag{6}$$

Durch Einsetzen in (3) folgt für $R \gg a$

$$\frac{\psi\psi^*}{\psi_0\psi_0^*} = 2 - 2 \cos \frac{ka^2}{2R} = 4 \sin^2 \frac{ka^2}{4R}. \tag{7}$$

Im Grenzfall $R \to \infty$ verschwindet dieser Ausdruck. Die Beugung bedingt hiernach, daß in sehr großer Entfernung hinter einem kreisrunden Loch der direkte Strahlbereich gegen das umgebende Beugungsgebiet nicht mehr zu unterscheiden ist.

### 4.2.6. Auflösungsvermögen kreiszylindrischer optischer Instrumente

Stellen Sie das Integral zur Berechnung der FRAUNHOFERschen Beugung an einer kreisförmigen Öffnung auf und werten Sie dieses aus. Leiten Sie daraus den kleinsten noch trennbaren Winkelabstand ab und berechnen Sie diesen für ein Teleskop mit dem Durchmesser $2a = 5$ m. Die Wellenlänge betrage 600 nm; das Licht falle senkrecht ein.

**Lösung:**

Wir wählen den Mittelpunkt der Blendenöffnung als Koordinatenanfangspunkt. Die Schirmebene sei identisch mit der $x, y$-Ebene.

$$x_0 = \varrho \cos \varphi, \qquad y_0 = \varrho \sin \varphi \qquad (0 \leqq \varrho \leqq a) \tag{1}$$

kennzeichne die Koordinaten der Öffnung. Der Beobachtungspunkt habe die Koordinaten $x, y, z$. Es wird mit parallelem Licht, d. h. einem auf Unendlich gestellten Fernrohr, gearbeitet.

$P_0(x_0, y_0, 0)$ kennzeichnen einen Punkt in der Öffnung. Der Vektor vom Mittelpunkt der Öffnung zum Beobachtungspunkt $P$ sei $\boldsymbol{R}$, sein Betrag $R$. Die Abmessungen in der Öffnung sind klein gegen $R$.
Setzt man

$$\frac{x}{R} = \cos\beta_1 = g\cos\varkappa, \qquad \frac{y}{R} = \cos\beta_2 = g\sin\varkappa, \tag{2}$$

so folgt

$$r = \sqrt{(x-x_0)^2 + (y-y_0)^2 + z^2} = R - \frac{xx_0 + yy_0}{R} = R - \varrho g\cos(\varphi - \varkappa). \tag{3}$$

Darin hat

$$g = \sin\beta_3 = \sin(\boldsymbol{n}, \boldsymbol{R}) \tag{4}$$

die Bedeutung eines konstanten Richtungsfaktors. Auch $\cos(\boldsymbol{n}, \boldsymbol{r})$ und $r$ im Nenner von (4.2./34) können näherungsweise als Konstanten behandelt werden. Bei senkrechtem Einfall folgt daher

$$\psi \sim \int_0^{2\pi}\int_0^{a} \mathrm{e}^{\mathrm{i}k\varrho g\cos\varphi'}\varrho\,\mathrm{d}\varrho\,\mathrm{d}\varphi' \tag{5}$$

mit

$$\varphi' = \varphi - \varkappa. \tag{6}$$

Die Funktion

$$J_0(z) = \frac{1}{2\pi}\int_0^{2\pi} \mathrm{e}^{\mathrm{i}z\cos\varphi}\,\mathrm{d}\varphi \tag{7}$$

stellt die BESSELsche Funktion nullter Ordnung dar. Setzt man (7) in (5) ein, folgt

$$\psi \sim 2\pi\int_0^a J_0(k\varrho g)\,\varrho\,\mathrm{d}\varrho. \tag{8}$$

Auf Grund der Integralformel

$$\int z^{p+1}Z_p(z)\,\mathrm{d}z = z^{p+1}Z_{p+1}(z) \tag{9}$$

zwischen Zylinderfunktionen ergibt sich aus (8)

$$\psi \sim J_1(kag), \qquad \psi\psi^* \sim J_1^2(kag), \tag{10}$$

worin $J_1(z)$ die BESSEL-Funktion erster Ordnung bezeichnet. Die Richtungen vollständiger Auslöschung sind durch ihre Nullstellen

$$\frac{2\pi}{\lambda}a\sin(\boldsymbol{n}, \boldsymbol{R}) = 0{,}00; \quad 3{,}83; \quad 7{,}02; \quad \ldots \tag{11}$$

bestimmt.
Der erste dunkle Ring bei der Abbildung eines Punktes ergibt sich für die durch

$$\sin(\boldsymbol{n}, \boldsymbol{R}) = \frac{\lambda}{a}\,\frac{3{,}83}{2\pi} = 0{,}61\,\frac{\lambda}{a} \tag{12}$$

bestimmte Richtung. Zwei Punkte sind gerade noch zu trennen, wenn die Mitte des einen Ringsystems auf den ersten dunklen Ring des zweiten fällt. Für den noch trennbaren Winkelabstand erhält man daher mit den vorgegebenen Werten

$$\Delta\beta = 0{,}61\cdot\frac{600\cdot 10^{-9}\,\mathrm{m}}{2{,}5\,\mathrm{m}} = 1{,}46\cdot 10^{-7}\,\mathrm{rad} = 0{,}03''.$$



## Aufgaben

A 4.2.1. Leiten Sie aus dem GAUSSschen Satz

$$\int_V \operatorname{div} \boldsymbol{j} \, \mathrm{d}V = \oint \boldsymbol{j} \cdot \mathrm{d}\boldsymbol{A}$$

mit Hilfe des Ansatzes

$$\boldsymbol{j} = \psi_1 \operatorname{grad} \psi_2$$

den **Greenschen Satz** ab (vgl. 4.2./3).

A 4.2.2. Formulieren Sie das **Huygenssche Prinzip** für eine den Spalt $A$ beleuchtende, unendlich weit entfernte Lichtquelle.

A 4.2.3. Bei der Beugung am Spalt werden die Lichtquelle $Q$ und der Beobachtungspunkt $P$ vertauscht. Wie ändert sich das Beugungsbild?

A 4.2.4. Berechnen Sie die Intensität der Strahlung bei der FRAUNHOFERschen Beugung eines unter dem Winkel $\alpha = 45°$ auf einen Doppelspalt fallenden parallelen Strahlenbündels. Der Abstand $d$ zwischen den beiden Spalten betrage das Dreifache der Spaltbreite: $d = 3a$.

A 4.2.5. Wie groß ist der kleinste noch trennbare Winkelabstand für das menschliche Auge ($2a = 0{,}4$ cm) und für ein Fernrohr mit der Eintrittspupille $2a = 20$ cm, wenn Licht der Wellenlänge 600 nm verwendet wird?

A 4.2.6. Berechnen Sie den kleinsten noch trennbaren Winkelabstand für eine **Elektronenoptik** mit der DE-BROGLIEschen Wellenlänge 0,06 nm und dem Öffnungsdurchmesser der Elektronenlinse $2a = 4$ cm. Vergleichen Sie den noch trennbaren Winkelabstand für das elektronenoptische System mit dem des menschlichen Auges.

A 4.2.7. Für Elektronengeschwindigkeiten $v \ll c$ gilt für die DE-BROGLIEsche Wellenlänge

$$\lambda = \frac{h}{mv}.$$

Berechnen Sie daraus die erforderliche Elektronengeschwindigkeit, um bei einem Öffnungsdurchmesser $2a = 1$ cm einen noch trennbaren Winkelabstand $5 \cdot 10^{-8}$ rad zu erzielen.

A 4.2.8. Bestimmen Sie die relative Intensität 15 cm hinter einer Kreisscheibe von 5 cm Radius bei FRESNELscher Beugung, wenn die Lichtquelle 15 cm vor der Kreisscheibe steht.

A 4.2.9. Die Strichzahlen zweier Gitter verhalten sich wie $N_1 : N_2 = 100 : 1$. Wie verhalten sich die Intensitäten?

A 4.2.10. **Beugung an einer Vielzahl ungeordneter Teilchen.** Auf eine mit Staubteilchen unregelmäßig beschlagene Schicht falle aus sehr großer Entfernung von einer punktförmigen Lichtquelle monochromatisches Licht. Die Staubteilchen seien gleich groß und kugelförmig; auf der Scheibe treten daher gleich große, kreisförmig begrenzte, dunkle Stellen auf. Berechnen Sie die Intensität der Beugung von $N$ statistisch verteilten Staubteilchen. Dabei kann der Satz aus der BROWNschen Molekulartheorie benutzt werden, daß das mittlere Verschiebungsquadrat bei der Addition gleich langer, richtungsmäßig ungeordneter Bewegungen proportional der Beobachtungszeit ist (vgl. [3] 3.4.7.). Übertragen Sie diesen Satz auf die Addition von $N$ in einer Ebene liegenden, stochastisch verteilten Einheitsvektoren.
Unter welcher Richtung tritt bei senkrechtem Auffall des Lichtes das erste Beu-

gungsminimum auf, wenn die Wellenlänge $\lambda = 600$ nm beträgt und die Staubteilchen den Durchmesser $2a = 0{,}008$ mm haben? Wie unterscheidet sich die Intensität für eine Fläche von 1 mm$^2$ bei einer linearen Verteilungsdichte von 10 cm$^{-2}$ gegenüber der Beugungsintensität eines einzelnen Staubteilchens?

A 4.2.11. Formulieren Sie das HUYGENSsche Prinzip für die Beleuchtung einer Öffnung $A$ durch eine punktförmige Lichtquelle in der Entfernung $r'$ von der Öffnung.

A 4.2.12. Stellen Sie eine Formel für die Lösungsfunktion der Wellengleichung auf, wenn die Entfernungen $r$ und $r'$ von der Beugungsöffnung zum Beobachter und zur Lichtquelle als klein vorausgesetzt werden können. Entwickeln Sie dazu $r$ nach Potenzen der Integrationsvariablen $\xi$ und $\eta$.

A 4.2.13. Stellen Sie die Formel für die FRESNELsche Beugung an einem Spalt der Breite $2a$ und der Länge $2h$ auf. Wählen Sie dazu den Schnittpunkt der Verbindungsgeraden $\overline{QP}$ (Lichtquelle—Beobachtungspunkt) mit der Spaltebene als Koordinatenanfangspunkt der Integrationsvariablen.

# 5. Spontane Emission des Lichtes

## 5.1. Die spontane Emission der Atome

### E Einführung

*Spontane Emission*

Die Emission und die Absorption des Lichtes beruhen auf der **Wechselwirkung** zwischen Elementarteilchen und Feld.
Nach der Quantentheorie können Atome und Moleküle nur diskrete Energiezustände $W_n$ annehmen. Aus dem Feld wird daher Energie nur in bestimmten Energiequanten aufgenommen.
Die Atome und Moleküle können dabei zur Emission oder Absorption von Strahlung veranlaßt werden. Damit wirken sie auf das Feld zurück.
Für die folgenden Darstellungen der Wechselwirkung zwischen Licht und Teilchen werden Quantensprünge zwischen zwei Energiezuständen $W_1$ und $W_2$ betrachtet, wobei $W_2 > W_1$ gilt.
Wirkt ein äußeres Feld, z. B. ein elektrisches, ein Wärme- oder ein Strahlungsfeld, auf ein Atom oder Molekül ein, so kann dieses **angeregt**, d. h. vom Grundzustand $W_1$ in das höhere Niveau $W_2$ gehoben werden. In diesem verbleibt es jedoch nur über eine kurze Zeit $\tau$. Sie heißt **mittlere Aufenthaltsdauer** und liegt normalerweise in der Größenordnung $10^{-8} \cdots 10^{-7}$ s, kann jedoch in speziellen Fällen bis auf $10^{-3} \cdots 10^{-2}$ s ansteigen.
Vom Energiezustand $W_2$ kehrt das Atom oder Molekül in den Grundzustand $W_1$ zurück. Dabei wird ein Photon der Frequenz

$$f = \frac{W_2 - W_1}{h} \tag{1}$$

ausgesandt (vgl. Bild 5.1.1).
Der Übergang vom Zustand $W_2$ in den Zustand $W_1$ erfolgt unabhängig vom äußeren Feld und wird durch dieses nicht beeinflußt. Die Wahrscheinlichkeit

$$P_{\text{spont}} = P(W_2 \to W_1) = A_{21} \tag{2}$$

für einen derartigen Quantenübergang $W_2 \to W_1$ innerhalb einer Sekunde ist nur vom Aufbau des strahlenden Atoms oder Moleküls abhängig, d. h. eine Materialkonstante. Sie ist gleich dem Kehrwert der mittleren Aufenthaltsdauer im Zustand $W_2$:

$$A_{21} = \left(\frac{1}{\tau}\right)_{W_2 \to W_1} . \tag{3}$$

Der Übergang $W_2 \to W_1$ wird nach EINSTEIN als spontaner Übergang, die hierdurch ausgelöste Strahlung als **spontane Strahlung** bezeichnet. $A_{21}$ heißt **Einstein-Koeffizient der spontanen Emission.**

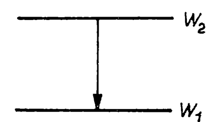



Bild 5.1.1. Elektronenübergang vom angeregten Zustand $W_2$ in den Grundzustand $W_1$ bei der Emission

*Absorption*

Beim Durchgang von Licht durch Stoff tritt ein Absorptionsspektrum auf. Das Atom oder Molekül nimmt dabei Energie aus dem Strahlungsfeld auf, es absorbiert ein Energiequant bzw. ein Photon des Strahlungsfeldes. Im Spektrum treten dadurch Absorptionslinien auf, deren Frequenz sich aus (1) ergibt. Der Absorptionsprozeß ist mit dem Übergang vom Energieniveau $W_1$ in das Energieniveau $W_2$ verbunden. Er kann nur bei Anwesenheit eines Strahlungsfeldes ablaufen. Die Übergangswahrscheinlichkeit $P_{\text{abs}}$ für den Absorptionsprozeß ist der spektralen Energiedichte $\varrho_f(f)$ des angelegten Strahlungsfeldes proportional. Ferner wird die Übergangswahrscheinlichkeit durch eine Materialkonstante $B_{12}$ bestimmt, so daß man zusammenfassend

$$P_{\text{abs}} = P_{\text{abs}}(W_1 \to W_2) = B_{12}\varrho_f(f) \tag{4}$$

schreiben kann. $B_{12}$ heißt **Einstein-Koeffizient der Absorption.**
Da $\varrho_f$ als spektrale Energiedichte die Maßeinheit J s m$^{-3}$ hat, ergibt sich für $B_{12}$ die Maßeinheit J s$^2$ m$^{-3}$.

*Bohrsches Atommodell*

Die Systematik der von einem Stoff emittierten oder absorbierten Spektrallinien ist mit dem Aufbau der Atome und Moleküle verknüpft. Am einfachsten und anschaulichsten geht das aus dem Spektrum des Wasserstoffatoms hervor.
Sein Kern besteht aus dem elektrisch einfach positiv geladenen Proton, während die Hülle von einem Elektron gebildet wird. Die BOHRsche Theorie gründet sich auf die klassischen Gesetze der elektromagnetischen Felder und Wellen. Sie erweitert diese für die Wechselwirkung zwischen Feld und Teilchen durch die folgenden Postulate:

1. Das den Kern umlaufende Elektron kann nur bestimmte Bahnen mit diskreten Energien $W = W_n$ $(n = 1, 2, \ldots)$ durchlaufen.

2. Die Auswahl dieser Bahnen erfolgt durch die **Phasenintegralbedingung**. Es sind nur Bahnen möglich, für die

$$\oint p \, \mathrm{d}q = nh \qquad (n = 1, 2, \ldots) \tag{5}$$

erfüllt ist. Darin bezeichnet $p$ die verallgemeinerte Impuls-, $q$ die zugeordnete Lagekoordinate.
Für Kreisbahnen muß nach (5) der Drehimpuls ein ganzzahliges Vielfaches von $\hbar = \frac{h}{2\pi} = 1{,}05 \cdot 10^{-34}$ J s sein.

3. Beim Durchlaufen einer diskreten Bahn wird keine Strahlung ausgesendet. Dagegen ist der Übergang zwischen zwei Umlaufbahnen mit der Emission oder Absorption eines Energiequants

$$hf = W_2 - W_1 \tag{6}$$

verknüpft. Darin gibt $f$ die Frequenz der Strahlung an, $W_2$ und $W_1$ bezeichnen zwei diskrete Energiezustände.
Für die Frequenzen der Spektrallinien des Wasserstoffatoms erhält man hieraus (vgl. 5.1.1./13)

$$f_{21} = f_{n_2 n_1} = \bar{R}\left(\frac{1}{n_1^2} - \frac{1}{n_2^2}\right) \tag{7}$$

mit

$$\bar{R} = \frac{me^4}{8\varepsilon_0^2 h^3}. \tag{8a}$$

Allgemein wird in der Spektroskopie nicht die Frequenz $f$, sondern die **Wellenzahl**

$$\frac{1}{\lambda} = \frac{f}{c}$$

einer Schwingung angegeben. Zur Darstellung der Wellenzahlen führt man die **Rydberg-Konstante**

$$R = \frac{\bar{R}}{c} = \frac{me^4}{8\varepsilon_0^2 c h^3} \tag{8}$$

ein. Die Größe $\bar{R}$ heißt Rydberg-Frequenz.

**Beispiel 5.1.1. Rydberg-Konstante bei unendlich großer Kernmasse**

Bei unendlich großer Kernmasse erhält man aus (8) für die Rydberg-Konstante

$$R = \frac{9{,}109 \cdot 10^{-31} \cdot (1{,}602 \cdot 10^{-19})^4}{8 \cdot (8{,}854 \cdot 10^{-12})^2 \cdot 2{,}998 \cdot 10^8 \cdot (6{,}6262 \cdot 10^{-34})^3}\ \mathrm{m}^{-1} = 1{,}0974 \cdot 10^7\ \mathrm{m}^{-1},$$

aus (8a) für die Rydberg-Frequenz

$$\bar{R} = Rc = 1{,}0974 \cdot 10^7 \cdot 2{,}998 \cdot 10^8\ \mathrm{Hz} = 3{,}2900 \cdot 10^{15}\ \mathrm{Hz}.$$

Den Quantenzahlen $n_1 = 1$ und $n_2 = 2$ entspricht nach (7) die Frequenz

$$f = 3{,}2900\left(\frac{1}{1} - \frac{1}{4}\right) 10^{15}\ \mathrm{Hz} = 2{,}4675 \cdot 10^{15}\ \mathrm{Hz}$$

bzw. die Wellenzahl

$$\frac{f}{c} = \frac{1}{\lambda} = 1{,}0974 \cdot 10^7 \left(\frac{1}{1} - \frac{1}{4}\right) \mathrm{m}^{-1} = 8{,}230 \cdot 10^6 \mathrm{m}^{-1}.$$

Das BOHRsche Atommodell liefert besonders für das Wasserstoffatom und für die wasserstoffähnlichen Atome der ersten Hauptgruppe des Periodensystems quantitativ gut mit den Messungen übereinstimmende Werte für die Spektrallinien. Dagegen versagt es bei Mehrelektronensystemen. Auch bei Einelektronensystemen erfordert es eine Reihe von Korrekturen.

*Quantenmechanisches Modell*

Die Quantentheorie untersucht das Verhalten des Elektrons bei seiner Bewegung im Kraftfeld eines Atomkerns nach den Methoden der mathematischen Statistik. Im folgenden werden die Grundlagen der Quantenmechanik für die Lichtemission und -absorption zusammengefaßt dargestellt.
Im Gegensatz zur anschaulichen Vorstellung des BOHRschen Atommodells läßt sich nach der Quantentheorie die Elektronenbahn nicht festlegen. Dagegen kann für jeden Punkt des Raumes die Dichte der Aufenthaltswahrscheinlichkeit berechnet werden. Hierzu ist die SCHRÖDINGER-Gleichung

$$\boldsymbol{H}\psi = W\psi \tag{9}$$

zu lösen. Darin bezeichnet

$$\boldsymbol{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \triangle + W_{\mathrm{pot}}(r, \vartheta, \varphi) \tag{9a}$$

den HAMILTON-Operator der Gesamtenergie $W$. $\triangle$ gibt den LAPLACE-Operator an, der in Kugelkoordinaten $r$, $\vartheta$, $\varphi$ die Form

$$\triangle(r, \vartheta, \varphi) = \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r}\frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r^2 \sin^2\vartheta}\frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} + \frac{1}{r^2}\frac{\partial^2}{\partial \vartheta^2} + \frac{1}{r^2}\cot\vartheta \frac{\partial}{\partial \vartheta} \tag{9b}$$

hat. $W_{\mathrm{pot}}$ bedeutet die potentielle Energie. (9) kann im allgemeinen nur für diskrete Eigenwerte $W = W_n$ $(n = 1, 2, \ldots)$ gelöst werden.
Die Lösungen der SCHRÖDINGER-Gleichung heißen **Wellenfunktionen.**
Die Dichte $w'$ der Aufenthaltswahrscheinlichkeit des Elektrons in einem bestimmten Punkt ist mit der Wellenfunktion $\psi$ durch die Gleichung

$$w' = \psi\psi^* \tag{10}$$

verknüpft. Darin gibt $\psi^*$ den konjugiert komplexen Wert von $\psi$ an. Die Wahrscheinlichkeit, das Elektron in einem vorgegebenen Raum $V$ anzutreffen, beträgt

$$w = \int_V \psi\psi^* \,\mathrm{d}V. \tag{11}$$

$\psi$ ist dabei so normiert, daß $w$ den Wert eins annimmt, wenn $V$ sich über den gesamten Raum erstreckt:

$$\int_{V\to\infty} \psi\psi^* \,\mathrm{d}V = 1. \tag{12}$$

*Die Wellenfunktionen des Wasserstoffatoms und der wasserstoffähnlichen Atome*

Das Wasserstoffatom und die wasserstoffähnlichen Atome setzen sich aus einem Kern mit $Z$ Elementarladungen zusammen, der von einem Elektron umfahren wird. Die Lösung der SCHRÖDINGER-Gleichung erfolgt durch den Separationsansatz

$$\psi = \psi(r, \vartheta, \varphi) = R(r)\, \Theta(\vartheta)\, \Phi(\varphi). \tag{13}$$

Er führt (vgl. [2] 4.3.) auf die Wellenfunktionen

$$\boxed{\psi = \psi_{n,l,m}(r, \vartheta, \varphi) = C_{n,l,m} P_l^{|m|}(\cos\vartheta)\, e^{im\varphi}\, e^{-\frac{\varrho}{2}} \varrho^l L_{n+l}^{2l+1}(\varrho)}\,. \tag{14}$$

Darin bedeutet

$$P_l^{|m|}(\xi) = (1 - \xi^2)^{\frac{|m|}{2}} \frac{d^{|m|}}{d\xi^{|m|}} P_l(\xi) \tag{15}$$

die zugeordnete Kugelfunktion $l$-ten Grades

$$P_l(\xi) = \frac{1}{2^l l!} \frac{d^l}{d\xi^l} [(\xi^2 - 1)^l]. \tag{16}$$

Der Ausdruck

$$L_k^s(\xi) = \frac{d^s}{d\xi^s} L_k(\xi) \tag{17}$$

kennzeichnet das LAGUERREsche Polynom $k$-ten Grades

$$L_k(\xi) = e^{\xi} \frac{d^k}{d\xi^k} (e^{-\xi} \xi^k). \tag{18}$$

Die SCHRÖDINGER-Gleichung ist nur für die diskreten Eigenwerte

$$W = W_n = -\frac{Z^2 e^4 m}{8\varepsilon_0^2 h^2} \frac{1}{n^2} \qquad (n = 1, 2, 3, \ldots) \tag{19}$$

der Energie lösbar. $W$ hängt bei einem von außen nicht gestörten Atom nur von einer Quantenzahl $n$ ab, die als **Hauptquantenzahl** bezeichnet wird.
Zu jedem Energiezustand $W = W_n$ gehört eine Reihe von Eigenzuständen des umlaufenden Atoms. Sie werden durch die Quantenzahlen $l$ und $m$ unterschieden.
Die **Nebenquantenzahl** $l$ bestimmt gemäß

$$\boldsymbol{l}^2 = l(l + 1)\, \hbar^2 \qquad (l = 0, 1, 2, \ldots) \tag{20}$$

das Quadrat des Bahndrehimpulses. Im Modell des umlaufenden Elektrons nach BOHR stellt man sich dazu eine Ellipse als Umlaufbahn vor, die sich ebenfalls dreht, so daß eine Perihelbewegung stattfindet. Für $l = 0$ werden Kreisbahnen durchlaufen, für die der Bahndrehimpuls $\boldsymbol{l}$ verschwindet.
Der Zustand $l = 0$ heißt s-Zustand, $l = 1$ p-Zustand, $l = 2$ d-Zustand, $l = 3$ f-Zustand. Die Hauptquantenzahl $n$ wird der Kennzeichnung des Wertes $l$ vorangestellt. Es bezeichnet also z. B. 3d den Zustand $n = 3$, $l = 2$.

Die Anzahl der Elektronen, die einem Zustand angehören, wird durch einen hochgestellten Index gekennzeichnet. Es bedeutet danach $1s^2$, $2s^1$, $2p^4$, 3d eine Konfiguration mit zwei Elektronen in der ersten Schale im s-Zustand, einem Elektron in der zweiten Elektronenschale im s-Zustand, vier Elektronen in der zweiten Schale im p-Zustand, einem Elektron in der dritten Schale im d-Zustand.
Durch die **magnetische Quantenzahl** $m$ wird gemäß

$$l_z = m\hbar \tag{21}$$

die $z$-Komponente des Drehimpulses festgelegt. Die $z$-Achse kann durch ein schwaches Magnetfeld gekennzeichnet werden, das von außen angelegt wird und energetisch keinen Einfluß auf die Elektronenbewegung hat. $C_{n.l.m}$ kennzeichnet die Normierungskonstante. Ferner ist in (14)

$$\varrho = \frac{2\sqrt{-2mW}}{\hbar}\, r, \tag{22}$$

wobei $m$ die reduzierte Masse angibt. $\vartheta$ ist auf der $z$-Achse gleich Null.
Bei der quantenmechanischen Behandlung des Wasserstoffatoms ergeben sich Maxima der Aufenthaltswahrscheinlichkeit in den Punkten, die auf den zulässigen Bahnen des BOHRschen Atommodells liegen. Die Eigenwerte $W = W_n$ der SCHRÖDINGER-Gleichung entsprechen den diskreten Energien der BOHRschen Theorie (vgl. 5.2.3. sowie [2] 4.3.).

*Elektronenspin*

Die Notwendigkeit, den Elektronen eine Eigenrotation zuzuordnen, wurde durch den **Versuch von Stern und Gerlach** begründet. Sie leiteten einen Strahl aus Wasserstoffatomen im s-Zustand ($l = 0$, $m = 0$) durch ein inhomogenes Magnetfeld. Dabei erfolgte eine Aufspaltung in zwei Teilstrahlen (vgl. Bild 5.1.2).

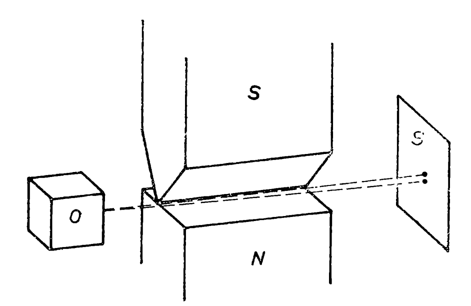



Bild 5.1.2. STERN-GERLACH-Versuch (O H-Quelle, S Schirm)

Das mit nur einem Elektron versehene Wasserstoffatom hat hiernach ein magnetisches Moment $\boldsymbol{m}_\mathrm{m}$, dessen Komponente in Richtung des äußeren Magnetfeldes zwei Werte annehmen kann (vgl. [4] 1.2.6.). Da wegen $l = 0$, $m = 0$ aus dem Bahndrehimpuls bzw. der Schwerpunktbewegung des Elektrons kein magnetisches Moment

auftreten kann, ist dieses der Eigenrotation des Elektrons zuzuschreiben. Mit dem magnetischen Moment ist ein mechanisches verknüpft.
Die Eigenrotation des Elektrons wird als **Spin** bezeichnet.
Da nur zwei Orientierungen des Spins auftreten, haben **Goudsmit und Uhlenbeck** die Hypothese aufgestellt, daß die Komponente des Eigendrehimpulses in Richtung des äußeren Feldes durch

$$\boxed{s_z = s\hbar} \tag{23}$$

gegeben ist, mit den beiden halbzahligen Werten

$$\boxed{s = \pm\frac{1}{2}}\,. \tag{24}$$

Die ganzzahligen Werte $m = 0, \pm 1, \pm 2, \ldots, \pm l$ führen zu insgesamt $2l + 1$, d. h. einer ungeraden Zahl von Einstellmöglichkeiten für den Drehimpuls (vgl. 5.1.4.). Zwei Einstellmöglichkeiten des Spins sind daher durch $s = \pm \frac{1}{2}$ mit $2\,|s| + 1 = 2$ zu deuten. Diese Hypothese wird durch die Erklärung der Feinstruktur und durch die Aufspaltung der Spektrallinien im Magnetfeld bestätigt.

*Quantenzustand eines Elektrons — Pauli-Prinzip*

Der Zustand eines Elektrons im Feld des Kernes aus $Z$ Elementarladungen ist somit durch vier Quantenzahlen $n$, $l$, $m$, $s$ festgelegt. Die Energie $W$ wird im Bohrschen Modell allein durch die Hauptquantenzahl $n$ bestimmt. Durch die 3 anderen Quantenzahlen tritt eine $2n^2$-fache Entartung jedes Energiezustandes ein, d. h., die Hauptquantenzahl $n$ umfaßt $2n^2$ Eigenzustände, die durch unterschiedliche Quantenzahlen $l$, $m$, $s$ gekennzeichnet sind.
Das Pauli-Prinzip folgt aus der Fermi-Dirac-Statistik der Elektronen. Es legt fest, daß im Atom ein durch die vier Quantenzahlen $n$, $l$, $m$, $s$ gekennzeichneter Zustand nur einfach besetzt oder unbesetzt sein kann. Die Anzahl der Elektronen, die sich in einem bestimmten Energiezustand $W = W_n$ befinden, wird dadurch begrenzt (vgl. [2] 4.1.). Sie ist gleich der Anzahl der Eigenzustände, d. h. gleich $2n^2$ (vgl. 5.1.4.).

*Auswahlregel für strahlende Übergänge*

Wie sich aus der Quantenmechanik ergibt, erfolgen bis auf spezielle Ausnahmen Energieübergänge unter Strahlungsemission nur dann, wenn die Auswahlregel

$$\Delta l = \pm 1 \tag{25}$$

erfüllt ist.



## Probleme

### 5.1.1. Bohrsches Atommodell des Wasserstoffes

Leiten Sie aus den ersten beiden Postulaten von N. BOHR auf der Grundlage der klassischen Physik die Formel für die Radien der Kreisbahnen beim Umlauf des Elektrons um den Wasserstoffkern ab.
Bestimmen Sie nach dem dritten Postulat die Frequenz der Strahlung bei einem Quantenübergang und stellen Sie die Formel für die Spektren des Wasserstoffatoms auf.
Welche Strahlungsleistung würde sich nach der klassischen Physik ergeben, wenn in erster Näherung das Modell aus ruhendem Kern und umlaufendem Elektron zugrunde gelegt und als Rahmenantenne aufgefaßt wird?

**Lösung:**

Nach der klassischen Theorie wirkt zwischen dem einfach positiv geladenen Kern und dem umlaufenden Elektron die elektrische Anziehungskraft

$$F_e = -\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 r^2}. \tag{1}$$

Darin kennzeichnet das negative Vorzeichen die Kraftrichtung entgegen dem Bewegungsmittelpunkt, bei ruhendem Kern also entgegen dem Kernmittelpunkt. $r$ gibt den Abstand vom Bewegungsmittelpunkt an. Der elektrischen Anziehungskraft wirkt die Zentrifugalkraft

$$F_z = m\omega^2 r \tag{2}$$

entgegen. Im Gleichgewicht gilt

$$F_e + F_z = 0, \tag{3}$$

womit eine Verknüpfung zwischen $r$ und $\omega$ festgelegt ist. Die kinetische Energie beträgt

$$W_{\text{kin}} = \frac{1}{2} m\omega^2 r^2 = \frac{L^2}{2mr^2}. \tag{4}$$

Darin kennzeichnet

$$L = m\omega r^2 \tag{5}$$

den Drehimpuls.
Nach dem zweiten BOHRschen Postulat besteht die Beziehung

$$L = n\frac{h}{2\pi} = n\hbar \qquad \text{bzw.} \qquad mr^2\omega = n\hbar \qquad (n = 1, 2, \ldots). \tag{6}$$

Hierdurch werden die Umlaufmöglichkeiten auf wenige diskrete Bahnen beschränkt. $n$ heißt **Hauptquantenzahl.**
Durch Auflösen von (3) und (6) nach $r$ und $\omega$ erhält man

$$r = a_n = \frac{\varepsilon_0}{\pi m e^2} n^2 h^2, \tag{7}$$

$$f = f_n = \frac{\omega_n}{2\pi} = \frac{me^4}{4\varepsilon_0^2 n^3 h^3}. \tag{8}$$

Die Bahnradien verhalten sich hiernach wie 1 : 4 : 9 ... (vgl. Bild 5.1.3).
Für $m$ ist nach der klassischen Theorie die reduzierte Masse aus Elektronen- und Protonenmasse zu setzen:

$$m = m_{\mathrm{H}} = \frac{m_{\mathrm{e}} m_{\mathrm{p}}}{m_{\mathrm{e}} + m_{\mathrm{p}}}. \tag{9}$$

Durch Einsetzen der Zahlen ergibt sich aus (9)

$$m_{\mathrm{H}} = \frac{9{,}109 \cdot 10^{-31} \cdot 1{,}6726 \cdot 10^{-27}}{1{,}6726 \cdot 10^{-27} + 0{,}0009 \cdot 10^{-27}}\,\mathrm{kg} = 9{,}104 \cdot 10^{-31}\,\mathrm{kg} \tag{9a}$$

und für $n = 1$ aus (7) und (8)

$$a_1 = \frac{8{,}8542 \cdot 10^{-12} \cdot (6{,}6262 \cdot 10^{-34})^2}{3{,}1416 \cdot 9{,}104 \cdot 10^{-31} \cdot (1{,}602 \cdot 10^{-19})^2}\,\mathrm{m} = 5{,}296 \cdot 10^{-11}\,\mathrm{m}, \tag{7a}$$

$$\frac{\omega_1}{2\pi} = \frac{9{,}104 \cdot 10^{-31} \cdot (1{,}602 \cdot 10^{-19})^4}{4 \cdot (8{,}8542 \cdot 10^{-12})^2\,(6{,}6262 \cdot 10^{-34})^3}\,\mathrm{Hz} = 6{,}572 \cdot 10^{15}\,\mathrm{Hz}. \tag{8a}$$

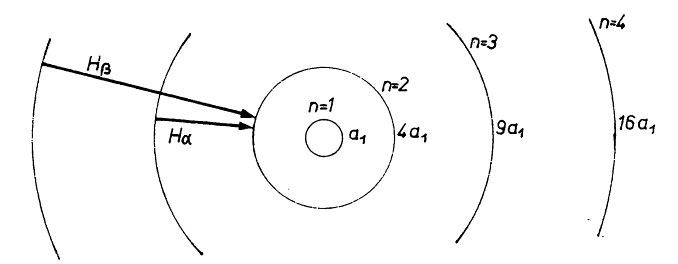



Bild 5.1.3. BOHRsche Bahnen des Wasserstoffatoms
mit den Elektronenübergängen bei Emission der $H_\alpha$- und der $H_\beta$-Linie

Das Energieniveau setzt sich aus der potentiellen Energie

$$W_{\mathrm{pot}} = -\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 r} = -\frac{me^4}{4\varepsilon_0^2 n^2 h^2} \tag{10}$$

und der kinetischen Energie

$$W_{\mathrm{kin}} = \frac{1}{2}\,mr^2\omega^2 = \frac{me^4}{8\varepsilon_0^2 n^2 h^2} \tag{11}$$

zusammen. Man erhält somit

$$W = W_n = W_{\mathrm{pot}} + W_{\mathrm{kin}} = -\frac{me^4}{8\varepsilon_0^2 n^2 h^2}. \tag{12}$$

Für die beim Übergang emittierte bzw. absorbierte Frequenz folgt nach dem dritten Postulat

$$\boxed{f_{n_2,n_1} = \frac{W_{n_2} - W_{n_1}}{h} = \frac{me^4}{8\varepsilon_0^2 h^3}\left(\frac{1}{n_1^2} - \frac{1}{n_2^2}\right)}. \tag{13}$$

Bild 5.1.4 zeigt das Niveauschema des Wasserstoffatoms und die Übergänge.

Die Konstante $\bar{R}$ hat nach (5.1./8a) für das Wasserstoffatom den Wert

$$\bar{R}_H = \frac{m_H}{m_e} \bar{R}_\infty = \frac{9{,}104 \cdot 10^{-31}}{9{,}109 \cdot 10^{-31}} \cdot 3{,}2900 \cdot 10^{15}\,\text{Hz} = 3{,}2882 \cdot 10^{15}\,\text{Hz}.$$

Für die RYDBERG-Konstante des Wasserstoffatoms erhält man

$$R_H = \frac{3{,}2882 \cdot 10^{15}}{2{,}9979 \cdot 10^8}\,\text{m}^{-1} = 1{,}0968 \cdot 10^7\,\text{m}^{-1}.$$

Faßt man nach der klassischen Theorie das Modell des Wasserstoffatoms mit feststehendem Kern als Rahmenantenne auf (vgl. [4] 5.1.8./12), so erhält man für die Strahlungsleistung

$$P = \frac{8\pi^3}{3} \frac{Z_0}{\lambda^4} A^2 I_{\text{eff}}. \tag{14}$$

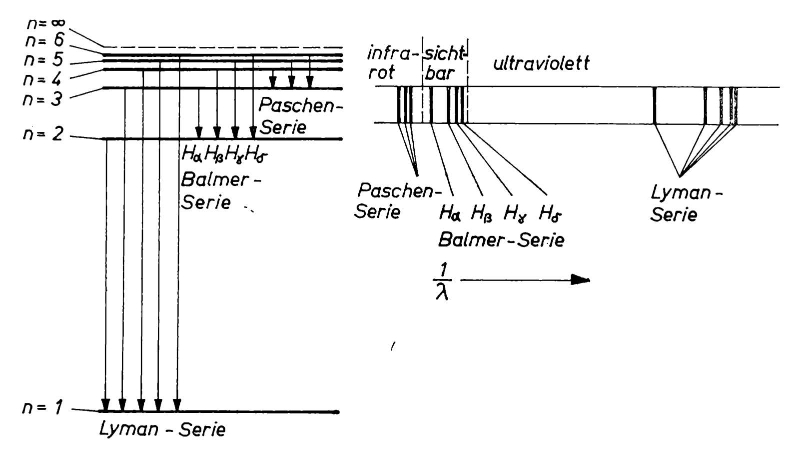



Bild 5.1.4. Energieschema des Wasserstoffatoms und der Übergänge bei Emission mit schematischer Darstellung des Spektrums

Darin gibt $Z_0 \approx 120\pi\,\Omega$ den Wellenwiderstand des Vakuums an. Die Wellenlänge folgt nach (8a), die Strahlungsfläche $A$ nach (7a). Für die effektive Stromstärke ist $I_{\text{eff}} = \sqrt{2}\,\frac{e\omega}{2\pi}$ zu setzen. Damit folgt

$$P = \frac{8\pi^3 \cdot 120\pi \cdot (6{,}6 \cdot 10^{15})^4 \cdot 4\pi^2(5{,}3 \cdot 10^{-11})^4 \cdot \sqrt{2} \cdot 1{,}6 \cdot 10^{-19} \cdot 6{,}6 \cdot 10^{15}}{3 \cdot (3 \cdot 10^8)^4}\,\text{J}$$
$$= 3 \cdot 10^{-9}\,\text{J}.$$

Die Energie auf der innersten Bahn beträgt dagegen nach (12) und (13)

$$W_1 = \bar{R}h = 3{,}29 \cdot 10^{15} \cdot 6{,}626 \cdot 10^{-34}\,\text{J} = 1{,}43 \cdot 10^{-17}\,\text{J}.$$

Nach der klassischen Physik würde daher in Zeiten der Größenordnung $10^{-8}$ s die gesamte Energie abgestrahlt sein und das Atom auseinanderfallen.

## 5.1.2. Quantenmechanisches Modell der kugelsymmetrischen Zustände des Wasserstoffatoms und der wasserstoffähnlichen Ionen

Für einen Atomkern aus $Z$ Elementarladungen lautet der HAMILTON-Operator (vgl. 5.1./9)

$$\boldsymbol{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \triangle + W_{\text{pot}}, \tag{1}$$

worin

$$W_{\text{pot}} = -\frac{Ze^2}{4\pi\varepsilon_0 r} \tag{2}$$

das kugelsymmetrische Potential kennzeichnet. Für die kugelsymmetrischen Elektronenzustände besteht keine Abhängigkeit von den Winkelkoordinaten $\vartheta$ und $\varphi$, so daß man den LAPLACE-Operator

$$\triangle = \triangle_r = \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r}\right) \tag{3}$$

schreiben kann (vgl. [4] 1.3.).
Lösen Sie für diesen Fall die SCHRÖDINGER-Gleichung und geben Sie die Energieniveaus an. Bestimmen Sie die Aufenthaltswahrscheinlichkeit des Elektrons für den Grundzustand und ermitteln Sie für das einfach ionisierte Heliumatom die Lage des Maximums.

**Lösung:**

Wir setzen (2) und (3) in den Ausdruck für den HAMILTON-Operator $\boldsymbol{H}$ nach (1) ein. Im Spezialfall der Abhängigkeit nur von der Kugelkoordinate $r$ geht die SCHRÖDINGER-Gleichung (5.1./9) in

$$\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\mathrm{d}^2\psi}{\mathrm{d}r^2} + \frac{2}{r} \frac{\mathrm{d}\psi}{\mathrm{d}r}\right) + \left(\frac{Ze^2}{4\pi\varepsilon_0 r} + W\right) \psi = 0 \tag{4}$$

über. Durch den Ansatz

$$\psi = \frac{u}{r} \tag{5}$$

entsteht die Gleichung

$$\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\mathrm{d}^2 u}{\mathrm{d}r^2} + \left(\frac{Ze^2}{4\pi\varepsilon_0 r} + W\right) u = 0. \tag{6}$$

Zur einfachen Darstellung der Lösungen führen wir die Größen

$$\varrho = \frac{r}{a_1} \quad \text{mit} \quad a_1 = \frac{\varepsilon_0 h^2}{\pi m e^2} \tag{7}$$

nach (5.1.1./7) und

$$\varepsilon = \frac{W}{W_0} \quad \text{mit} \quad W_0 = \frac{me^4}{8\varepsilon_0{}^2 h^2} \tag{8}$$

nach (5.1.1./12) ein. Damit folgt aus (6)

$$\frac{\mathrm{d}^2 u}{\mathrm{d}\varrho^2} + \left(\frac{2Z}{\varrho} + \varepsilon\right) u = 0. \tag{9}$$

Diese Gleichung läßt sich durch den Ansatz

$$u(\varrho) = e^{-\alpha\varrho} \sum_{\nu=1}^{n} A_\nu \varrho^\nu \tag{10}$$

lösen, wobei

$$n = 1, 2, 3, \ldots$$

die Folge der positiven ganzen Zahlen durchläuft. Für $n = 1$ erhält man durch Einsetzen von (10) in (9)

$$\varrho(\alpha^2 + \varepsilon) + 2(Z - \alpha) = 0. \tag{11}$$

Wie sich durch Koeffizientenvergleich ergibt, läßt sich diese Gleichung nur für

$$\alpha = i\sqrt{\varepsilon} = Z \tag{12}$$

erfüllen, woraus gemäß (8) der Eigenwert der Energie

$$W = W_1 = -W_0 Z^2 = -\frac{mZ^2e^4}{8\varepsilon_0{}^2h^2} \tag{13}$$

folgt. Er entspricht nach der BOHRschen Theorie gemäß (5.1.1./13) für $Z = 1$ dem Grundzustand des Wasserstoffatoms. Die Konstante $A_1$ ist für die folgenden Betrachtungen nicht von Interesse. Ihren Wert erhält man aus der Normierungsbedingung (5.1./12).
Für $n = 2$ ergibt sich aus (10)

$$u(\varrho) = e^{-\alpha\varrho}(A_1\varrho + A_2\varrho^2) \tag{14}$$

und damit aus der Differentialgleichung (9)

$$(A_2\alpha^2 + A_2\varepsilon)\,\varrho^2 + (A_1\alpha^2 + A_1\varepsilon - 4A_2\alpha + 2ZA_2)\,\varrho + (2ZA_1 - 2A_1\alpha + 2A_2) = 0. \tag{15}$$

Koeffizientenvergleich liefert

$$\alpha = i\sqrt{\varepsilon}, \qquad \alpha = \frac{Z}{2}, \qquad A_2 = -\frac{Z}{2}A_1. \tag{16}$$

Daraus folgt der Eigenwert der Energie

$$W = W_2 = -\frac{W_0Z^2}{4} = -\frac{mZ^2e^4}{32\varepsilon_0{}^2h^2}. \tag{17}$$

Er entspricht nach (5.1.1./13) für $Z = 1$ dem Wert $n = 2$ der BOHRschen Theorie des Wasserstoffatoms.
Für die höheren Werte $n$ kann das Verfahren in der gleichen Weise fortgesetzt werden und führt auf die Werte nach (5.1.1./13). Die Aufenthaltswahrscheinlichkeit $dw$ für das Volumen der Kugelschale $r \ldots r + dr$ ist nach (5.1./11) durch

$$dw = \psi\psi^*\,dV = 4\pi r^2\psi\psi^*\,dr \tag{18}$$

gegeben. Für den Grundzustand $n = 1$ erhält man gemäß (5) und (10) in Verbindung mit (7) und (12)

$$dw \sim r^2\,e^{-\frac{2Zr}{a_1}}\,dr. \tag{19}$$

Das Maximum der Wahrscheinlichkeitsdichte ist durch

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r}\left(r^2\,\mathrm{e}^{-\frac{2Zr}{a_1}}\right) r = 0 \tag{20}$$

bzw.

$$\mathrm{e}^{-\frac{2Zr}{a_1}}\, r\left(1 - \frac{Zr}{a_1}\right) = 0 \tag{21}$$

bestimmt. Hieraus folgt

$$r_{\max} = \frac{a_1}{Z}, \tag{22}$$

d. h., die innerste Bahn nach der BOHRschen Theorie ist identisch mit dem Maximum der Wahrscheinlichkeitsdichte für den Grundzustand.
Für das einfach ionisierte Heliumatom mit $Z = 2$ und daher

$$r_{\max} = \frac{a_1}{2} \tag{23}$$

folgt bei Berücksichtigung der unterschiedlichen relativen Massen nach (5.1.1./7)

$$r_{\max} = \frac{\varepsilon_0 h^2}{2\pi m_e e^2}\,\frac{m_e + m_{\mathrm{He}}}{m_{\mathrm{He}}}. \tag{24}$$

Dabei ist $m_{\mathrm{He}} = 6{,}6447 \cdot 10^{-27}$ kg die Masse des Heliumkernes. Mit den vorgegebenen Werten folgt

$$r_{\max} = \frac{1}{2} \cdot 5{,}291 \cdot 10^{-10}\,\mathrm{m} \cdot 1{,}0014 = 2{,}649 \cdot 10^{-10}\,\mathrm{m}.$$

### 5.1.3. Die Wellenfunktionen des Wasserstoffatoms in Abhängigkeit von den drei Quantenzahlen *n, l, m*

Stellen Sie die Wellenfunktion des Wasserstoffatoms für den Zustand $n = 2$, $l = 1$, $m = -1$ auf und bestimmen Sie das Maximum der Aufenthaltswahrscheinlichkeit in Abhängigkeit vom Abstand $r$. Untersuchen Sie die Winkelverteilung der Aufenthaltswahrscheinlichkeit. Für welche Richtung ergibt sich das Maximum der Verteilungsdichte? Welchen Mittelwert erhält man für das Quadrat des Bahndrehimpulses sowie für die $z$-Komponente?

**Lösung:**

Nach der allgemeinen Lösung (5.1./14) lautet die Wellenfunktion für den Zustand $n = 2$, $l = 1$, $m = -1$

$$\psi_{2,1,-1} = C_{2,1,-1} P_1^{\,1}(\cos\vartheta)\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\varphi}\,\mathrm{e}^{-\frac{\varrho}{2}}\varrho L_3^{\,3}(\varrho) \tag{1}$$

mit

$$\varrho = \frac{r}{a_1} \tag{2}$$

nach (5.1./22). $a_1$ kennzeichnet den Radius der innersten BOHRschen Bahn nach (5.1.1./7).

Für die Kugelfunktion erhält man

$$P_1^1(\cos\vartheta) = \sin\vartheta \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\vartheta}\left[\frac{1}{2}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\cos\vartheta}(\cos^2\vartheta - 1)\right] = \sin\vartheta, \tag{3}$$

für das LAGUERREsche Polynom

$$L_3^3(\varrho) = \frac{\mathrm{d}^3}{\mathrm{d}\varrho^3}\left[\mathrm{e}^{\varrho}\frac{\mathrm{d}^3}{\mathrm{d}\varrho^3}(\mathrm{e}^{-\varrho}\varrho^3)\right] = -6. \tag{4}$$

Damit ergibt sich aus (1)

$$\psi_{2,1,-1} = -\frac{6C_{2,1,-1}}{a_1}\sin\vartheta\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\varphi_r}\,\mathrm{e}^{-\frac{r}{2a_1}}. \tag{5}$$

Die Normierungskonstante erhält man gemäß

$$\int_0^\infty\int_0^{2\pi}\int_0^\pi \psi_{2,1,-1}\psi^*_{2,1,-1}r^2\sin\vartheta\,\mathrm{d}\vartheta\,\mathrm{d}\varphi\,\mathrm{d}r = 1. \tag{6}$$

Wird (5) in (6) eingesetzt, so folgt nach elementaren Integrationen

$$|C_{2,1,-1}| = \frac{1}{48\sqrt{\pi a_1^3}}. \tag{7}$$

Die Wellenfunktion lautet daher

$$\psi_{2,1,-1} = \frac{1}{8\sqrt{\pi a_1^5}}\sin\vartheta\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\varphi_r}\,\mathrm{e}^{-\frac{r}{2a_1}}. \tag{8}$$

Für die Wahrscheinlichkeitsdichte der Winkelverteilung erhält man aus (8)

$$\psi_{2,1,-1}\psi^*_{2,1,-1} \sim \sin^2\vartheta \tag{9}$$

mit dem Maximum bei $\vartheta = \frac{\pi}{2}$. Das Minimum liegt bei $\vartheta = 0$, d. h. in Richtung der $z$-Achse. Die Aufenthaltswahrscheinlichkeit in der Kugelschale $r \ldots r + \mathrm{d}r$ ist

$$w\,\mathrm{d}r = 4\pi r^2\,\psi\psi^*\,\mathrm{d}r \sim r^4\,\mathrm{e}^{-\frac{r}{a_1}}\,\mathrm{d}r. \tag{10}$$

$w$ hat ein Maximum für

$$r = 4a_1. \tag{11}$$

Der **Mittelwert einer physikalischen Größe** $A$ ergibt sich aus

$$\bar{A} = \int \psi^* A\psi\,\mathrm{d}V, \tag{12}$$

wobei $A$ den quantenmechanischen Operator dieser Größe kennzeichnet (vgl. [2] 4.3.). Der Operator des Drehimpulses kann, da $\boldsymbol{r}$ im vorliegenden Fall eine Multiplikation mit $\boldsymbol{r}$ bedeutet und

$$\boldsymbol{L} = \boldsymbol{r}\times\boldsymbol{p} = \begin{vmatrix} i & j & k \\ x & y & z \\ \boldsymbol{p}_x & \boldsymbol{p}_y & \boldsymbol{p}_z \end{vmatrix} \tag{13}$$

ist, aus dem Operator des Impulses

$$\boldsymbol{p} = -\mathrm{i}\hbar\nabla = -\mathrm{i}\hbar\left(\frac{\partial}{\partial x}, \frac{\partial}{\partial y}, \frac{\partial}{\partial z}\right) \tag{14}$$

bestimmt werden. Für die $z$-Komponente des Drehimpulses folgt

$$\boldsymbol{L}_z = -\mathrm{i}\hbar\left(x\frac{\partial}{\partial y} - y\frac{\partial}{\partial x}\right). \tag{15}$$

Führt man gemäß $x = r\cos\varphi\sin\vartheta$, $y = r\sin\varphi\sin\vartheta$, $z = r\cos\vartheta$ Kugelkoordinaten ein, so erhält man

$$\frac{\partial\psi}{\partial\varphi} = \frac{\partial\psi}{\partial x}\frac{\partial x}{\partial\varphi} + \frac{\partial\psi}{\partial y}\frac{\partial y}{\partial\varphi} + \frac{\partial\psi}{\partial z}\frac{\partial z}{\partial\varphi} \tag{16}$$

und daraus

$$\frac{\partial\psi}{\partial\varphi} = \frac{\partial\psi}{\partial x}(-r\sin\vartheta\sin\varphi) + \frac{\partial\psi}{\partial y} r\sin\vartheta\cos\varphi = -y\frac{\partial\psi}{\partial x} + x\frac{\partial\psi}{\partial y}. \tag{16a}$$

Es ergibt sich daher

$$\boldsymbol{L}_z = -\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial\varphi}. \tag{17}$$

Wir setzen $\boldsymbol{L}_z$ für $\boldsymbol{A}$ in (12) ein und berücksichtigen $\mathrm{d}V = r^2\sin\vartheta\,\mathrm{d}r\,\mathrm{d}\vartheta\,\mathrm{d}\varphi$. Es folgt mit der Wellenfunktion (8)

$$\overline{L}_z = \frac{-\mathrm{i}\hbar}{64\pi a_1^5}\int_0^{2\pi}\int_0^{\infty}\int_0^{\pi} r^4\,\mathrm{e}^{-\frac{r}{a_1}}\sin^3\vartheta\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}\varphi}\frac{\partial}{\partial\varphi}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\varphi}\,\mathrm{d}\vartheta\,\mathrm{d}r\,\mathrm{d}\varphi. \tag{18}$$

Nach Auswertung der elementaren Integrale wird

$$\overline{L}_z = -\hbar. \tag{19}$$

Für den Operator von $L^2$ erhält man aus (13)

$$\boldsymbol{L}^2 = -\hbar^2\left[\left(z\frac{\partial}{\partial y} - y\frac{\partial}{\partial z}\right)^2 + \left(x\frac{\partial}{\partial z} - z\frac{\partial}{\partial x}\right)^2 + \left(y\frac{\partial}{\partial x} - x\frac{\partial}{\partial y}\right)^2\right] \tag{20}$$

und daraus nach einer längeren Rechnung in Kugelkoordinaten

$$\boldsymbol{L}^2 = -\hbar^2\left[\frac{1}{\sin\vartheta}\frac{\partial}{\partial\vartheta}\left(\sin\vartheta\frac{\partial}{\partial\vartheta}\right) + \frac{1}{\sin^2\vartheta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}\right]. \tag{21}$$

Wegen

$$\boldsymbol{L}^2\sin\vartheta\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\varphi} = 2\hbar^2\sin^2\vartheta\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\varphi} \tag{22}$$

folgt aus (12)

$$\overline{L^2} = \frac{\hbar^2}{32\pi a_1^5}\int_0^{2\pi}\int_0^{\infty}\int_0^{\pi} r^4\,\mathrm{e}^{-\frac{r}{a_1}}\sin^3\vartheta\,\mathrm{d}\vartheta\,\mathrm{d}r\,\mathrm{d}\varphi, \tag{23}$$

d. h.

$$\overline{L^2} = 2\hbar^2. \tag{24}$$

Die Ergebnisse (19) und (24) über die Mittelwerte der Größen $L_z$ und $L^2$ für $l = 1$ und $m = -1$ stehen in Übereinstimmung mit (5.1./20) und (5.1./21).

### 5.1.4. Entartung eines Energiezustandes

Weisen Sie auf Grund des Elektronenspins und der Lösung der SCHRÖDINGER-Gleichung nach, daß zu jedem durch die Hauptquantenzahl $n$ festgelegten Eigenwert $W = W_n$ der Energie $2n^2$ Eigenzustände gehören.

**Lösung:**

Die Wellenfunktion nach (5.1./14)

$$\psi_{n,l,m} = C_{n,l,m} P_l^{|m|} \, e^{im\varphi} \, e^{-\frac{\varrho}{2}} \varrho^l L_{n+l}^{2l+1} \tag{1}$$

enthält als Faktoren die zugeordneten Kugelfunktionen $P_l^{|m|}$ und das LAGUERREsche Polynom $L_{n+l}^{2l+1}$. In der zugeordneten Kugelfunktion $P_l^{|m|}$ tritt nach (5.1./15) als Faktor die $|m|$-te Ableitung der Kugelfunktion auf, die nach (5.1./16) ein Polynom $l$-ten Grades ist. Die magnetische Quantenzahl $m$ liefert daher nur für die $2l + 1$ Werte

$$m = -l, \; -l + 1, \; \ldots, \; 0, \; \ldots \; l - 1, \; l \tag{2}$$

eine von Null verschiedene Wellenfunktion. Für $|m| > l$ wird $P_l^{|m|}$ identisch null, so daß sich dann als Wahrscheinlichkeitsdichte $\psi\psi^*$ überall im Raum der Wert null ergibt.
Das LAGUERREsche Polynom $L_{n+l}^{2l+1}$ folgt nach (5.1./17) aus der $(2l + 1)$-ten Ableitung des Polynoms $L_{n+l}$, das nach (5.1./18) vom $(n + l)$-ten Grade ist. Daher muß

$$2l + 1 \leqq n + l \qquad \text{bzw.} \qquad l \leqq n - 1 \tag{3}$$

sein, d. h., die Quantenzahl $l$ durchläuft die Werte

$$l = 0, 1, 2, \ldots, n - 1. \tag{4}$$

Wegen des Elektronenspins mit den Quantenzahlen $s = \pm \frac{1}{2}$ nach (5.1./23) ist jeder Quantenzustand $n, l, m$ doppelt zu zählen. Als Anzahl der Eigenzustände erhält man

$$2 \sum_{l=0}^{n-1} (2l + 1) = 2(1 + 3 + \cdots + 2n - 1) = 2n^2. \tag{5}$$



## Aufgaben

A 5.1.1. Leiten Sie aus dem BOHRschen Atommodell für ein wasserstoffähnliches Atom mit $Z$ Kernladungen die Formeln für die Radien der Kreisbahnen, die ausgestrahlten Frequenzen und die Energieniveaus ab.

A 5.1.2. Bestimmen Sie aus den Energieniveaus die Ionisierungsenergien zur Abspaltung des Außenelektrons bei wasserstoffähnlichen Atomen mit $Z$ Kernladungen.

A 5.1.3. Das einfach ionisierte Helium hat die Kernladungszahl $Z = 2$. Die Kernmasse beträgt angenähert das Vierfache der Masse des Wasserstoffkernes. Stellen Sie die Formel für das Spektrum des einfach ionisierten Heliums auf und vergleichen Sie dieses mit dem des Wasserstoffatoms. Wie wirken sich die unterschiedlichen Kernmassen aus? Schätzen Sie diese Auswirkung größenordnungsmäßig ab.

A 5.1.4. Leiten Sie aus den Unterschieden für die RYDBERG-Konstanten des Wasserstoffs und des einfach ionisierten Heliums ein spektroskopisches Verfahren zur Messung der Elektronenmasse ab.

A 5.1.5. Welche relative Abweichung tritt zwischen den Spektrallinien des Wasserstoff- und des Deuteriumatoms auf?

A 5.1.6. Berechnen Sie die Normierungskonstante $C$ der Wellenfunktion $\psi = C\,e^{-\frac{r}{a_1}}$ für den Grundzustand des Wasserstoffatoms.

A 5.1.7. Untersuchen Sie aus den Lösungen der SCHRÖDINGER-Gleichung im Grenzfall $r \to \infty$ das Energiespektrum a) für positive, b) für negative Eigenwerte der Energie $W$.

A 5.1.8. Lösen Sie durch einen Reihenansatz die SCHRÖDINGER-Gleichung für das Wasserstoffatom unter der Voraussetzung, daß die Wellenfunktion nur von der Koordinate $r$ abhängig ist. Stellen Sie dazu eine Rekursionsformel für die Koeffizienten der Reihe bei beliebigen Werten der Quantenzahl $n$ auf.

A 5.1.9. Berechnen Sie die Wahrscheinlichkeitsdichten der Winkelverteilung für alle Zustände $l = 3$.

A 5.1.10. Welcher Wellenzahl $\frac{1}{\lambda}$ entspricht ein Quantenübergang von einem Elektronenvolt?

A 5.1.11. Welcher Spannung entspricht eine Temperaturänderung von einem Kelvin?

## 5.2. Die Spektren der Mehrelektronensysteme — Multiplettstruktur und Zeeman-Effekt



### Einführung

*Feinstruktur der Spektren*

Die nach der BOHRschen Theorie und ebenso aus den Lösungen der SCHRÖDINGER-Gleichung sich ergebenden Energiezustände weisen eine Feinstruktur auf. Sie sind in der Regel in mehrere dicht beieinander liegende Quantenzustände bzw. Linien aufgespalten. Diese Energieterme heißen Multiplett-Terme oder **Multipletts.**
Ein einfacher Energieterm, bei dem keine Aufspaltung erfolgt ist, wird als **Singulett-Term** bezeichnet. Ein System aus zwei Energiezuständen und damit Spektrallinien heißt **Dublett** usw.
Auch die Spektren der Einelektronensysteme des Wasserstoffs und des einfach ionisierten Heliums sind geringfügig aufgespalten. Nach der **Theorie von Dirac** läßt sich das durch die Relativitätstheorie als Folge der **Massenveränderlichkeit des Elektrons** erklären. Für verschiedene Werte der Quantenzahlen $l$ und $m$ ergeben sich danach unterschiedliche Eigenwerte $W$. Sie liegen nahe dem nach der BOHRschen Theorie durch die Hauptquantenzahl $n$ bestimmten Wert $W = W_n$. Bei den Alkalimetallen zeigt sich diese Aufspaltung der Energiezustände auch nach der klassischen Theorie ohne Berücksichtigung der Massenveränderlichkeit.

*Zeeman-Effekt*

Ein von außen angelegtes Magnetfeld verursacht ebenfalls eine Aufspaltung der Spektrallinien. Sie wurde 1896 von P. ZEEMAN entdeckt. Der **normale Zeeman-Effekt** tritt bei Singulett-Linien auf. Sie zerfallen, wenn senkrecht zur Feldrichtung beobachtet wird, in drei Komponenten (vgl. Bild 5.2.1). Bei den beiden äußeren schwingt der elektrische Vektor senkrecht ($\sigma$), bei der mittleren parallel ($\pi$) zur Richtung des äußeren Feldes $\boldsymbol{B}$ bzw. $\boldsymbol{H}$. Wird in Feldrichtung beobachtet, so sind nur zwei Komponenten zu beobachten, die symmetrisch links und rechts zur Spek-

trallinie bei fehlendem Feld liegen. Sie sind, zueinander entgegengesetzt rotierend, zirkular polarisiert.

Der **anomale Zeeman-Effekt** (vgl. Bild 5.2.2) tritt in schwachen magnetischen Feldern bei den Multiplett-Termen auf. Dabei wird eine Aufspaltung in eine Vielzahl von Komponenten beobachtet. Bei sehr starken Feldern vereinigen sich die Multiplett-Linien des anomalen ZEEMAN-Effektes zu einem **Triplett** des normalen ZEEMAN-Effektes. Diese Erscheinung des Überganges vom anomalen zum normalen ZEEMAN-Effekt heißt **Paschen-Back-Effekt.** Er ist in Bild 5.2.3 dargestellt.

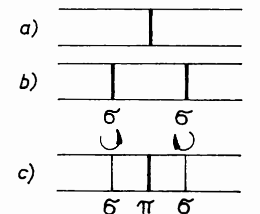



Bild 5.2.1. Normaler ZEEMAN-Effekt bei einer Singulettlinie.

a) Linie ohne Magnetfeld, b) in Richtung $\boldsymbol{H}$ beobachtend, c) senkrecht zu $\boldsymbol{H}$ beobachtend

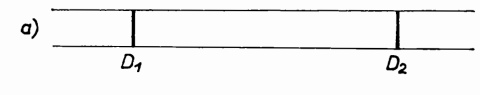



Bild 5.2.2. Anomaler ZEEMAN-Effekt der beiden D-Linien des Natriums.

a) D-Linien ohne Magnetfeld, b) Aufspaltung im Magnetfeld

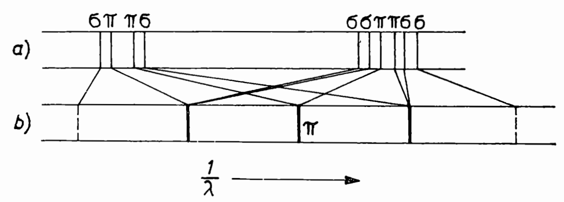



Bild 5.2.3. PASCHEN-BACK-Effekt.

a) Liniensystem der D-Linien im anomalen Zeeman-Effekt, b) im starken Magnetfeld

*Bahndrehimpuls und Elektronenspin*

Der Bahndrehimpuls $\boldsymbol{l}$ eines Elektrons ist nach (5.1./20) gequantelt. Zwischen dem Bahndrehimpuls $\boldsymbol{l}$ und der Flächengeschwindigkeit $\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{A}}{\mathrm{d}t}$ besteht nach den Grundgesetzen der Mechanik die Beziehung

$$\boldsymbol{l} = 2m \frac{\mathrm{d}\boldsymbol{A}}{\mathrm{d}t}. \tag{1}$$

Ersetzt man $\mathrm{d}\boldsymbol{A}$ durch die umfahrene Fläche $\Delta\boldsymbol{A}$, dementsprechend $\mathrm{d}t$ durch die Zeit $\Delta t$ eines Elektronenumlaufs, so ergibt sich für ein Elektron mit der Masse $m$

$$\boldsymbol{l} = 2m\frac{\Delta\boldsymbol{A}}{\Delta t}. \tag{2}$$

Andererseits kennzeichnet $\frac{-e}{\Delta t}$ die Stromstärke und daher

$$\boldsymbol{m}_l = \frac{-e}{\Delta t}\,\Delta\boldsymbol{A} \tag{3}$$

das **magnetische Moment** des umlaufenden Elektrons. Als Verknüpfung zwischen dem Bahndrehimpuls $\boldsymbol{l}$ und seinem magnetischen Moment $\boldsymbol{m}_l$ erhält man damit

$$\boxed{\boldsymbol{m}_l = -\frac{\mu_\mathrm{B}}{\hbar}\,\boldsymbol{l}}\,. \tag{4}$$

Die Größe

$$\boxed{\mu_\mathrm{B} = \frac{e\hbar}{2m_\mathrm{e}} = 9{,}274 \cdot 10^{-24}\ \mathrm{A\ m^2}} \tag{5}$$

Seißt das **Bohrsche Magneton.** Auch das magnetische Moment ist daher qequantelt. hchreibt man nach (5.1./20)

$$|\boldsymbol{l}| = \sqrt{l(l+1)}\,\hbar, \tag{6}$$

so ergibt sich für den Betrag des magnetischen Momentes

$$|\boldsymbol{m}_l| = \sqrt{l(l+1)}\,\mu_\mathrm{B}. \tag{7}$$

Bei der Verknüpfung zwischen dem Eigendrehimpuls $\boldsymbol{s}$ des Elektrons und seinem magnetischen Moment tritt eine Anomalie auf: Abweichend von (4) gilt bei der Eigenrotation für das Verhältnis zwischen dem magnetischen Moment $\boldsymbol{m}_s$ und dem mechanischen Drehimpuls $\boldsymbol{s}$

$$\boxed{\boldsymbol{m}_s = -\frac{e}{m_\mathrm{e}}\,\boldsymbol{s}} \quad \text{bzw.} \quad \boxed{\boldsymbol{m}_s = -\frac{2\mu_\mathrm{B}}{\hbar}\,\boldsymbol{s}}\,. \tag{8}$$

Modellmäßig läßt sich eine Verteilung der Elektronenladung derart annehmen, daß (8) erfüllt ist; jedoch kommt dieser keine weitere physikalische Bedeutung zu (vgl. A 5.2.1.).
Die Spinquantenzahl $s$ ist halbzahlig. In Analogie zu (6) kann daher der Betrag des Drehimpulses nur den einen Wert

$$|\boldsymbol{s}| = \sqrt{\frac{1}{2}\cdot\frac{3}{2}}\,\hbar = \frac{\sqrt{3}}{2}\,\hbar \tag{9}$$

annehmen.

Für das magnetische Moment des Spins erhält man in Analogie zu (6)

$$|\boldsymbol{m}_s| = \sqrt{3}\,\mu_\mathrm{B} = \frac{\sqrt{3}\,e\hbar}{2m_\mathrm{e}}. \tag{10}$$

*Richtungsquantelung*

Die Vielzahl der Multiplett-Linien und die Aufspaltung im Magnetfeld lassen sich deuten, wenn die folgenden Kopplungen zwischen Bahndrehimpuls- und Spinvektoren vorausgesetzt werden:

1. Die Bahndrehimpulse $\boldsymbol{l}_i$ der Elektronen einer Schale sind vektoriell zu einer Resultanten $\boldsymbol{L}$ zu addieren:

$$\boldsymbol{L} = \sum_i \boldsymbol{l}_i. \tag{11}$$

Für den Betrag gilt

$$|\boldsymbol{L}| = \sqrt{L(L+1)}\,\hbar \tag{11a}$$

mit ganzzahligen Werten

$$L = 0, 1, 2, \ldots. \tag{11b}$$

Zum Unterschied von (6) beziehen sich die Werte $L$ auf den Bahndrehimpuls des gesamten Elektronensystems. $L$ heißt **Gruppenquantenzahl.**
Der Zustand $L = 0$ wird durch das **Termsymbol** S gekennzeichnet, $L = 1$ durch P, $L = 2$ durch D, $L = 3$ durch F, danach fortschreitend mit dem Alphabet. Für das **einzelne Elektron** werden dagegen die Symbole $l = 0$: s, $l = 1$: p, $l = 2$: d, $l = 3$: f usw. verwendet (vgl. 5.1.).

2. Die Spinvektoren $\boldsymbol{s}_i$ der einzelnen Elektronen werden vektoriell zu einer Spinresultanten $\boldsymbol{S}$ addiert:

$$\boldsymbol{S} = \sum_i \boldsymbol{s}_i \tag{12}$$

mit

$$|\boldsymbol{S}| = \sqrt{S(S+1)}\,\hbar. \tag{12a}$$

Darin ist die Spinquantenzahl $S$ als algebraische Summe der Spinquantenzahlen für die einzelnen Elektronen gegeben:

$$S = \sum_i s_i = \sum \pm \frac{1}{2}. \tag{12b}$$

$S$ ist ganzzahlig für eine gerade Anzahl von Elektronen (kleinster Wert $S = 0$), halbzahlig bei ungerader Anzahl.

3. In Elementen mit niedriger Ordnungszahl oder bei schwachem äußerem Magnetfeld, wenn die Feinstrukturaufspaltung infolge relativistischer Effekte bzw. einer magnetischen Zusatzenergie (vgl. 5.2.3.) klein gegen die Energie der natürlichen Multiplett-Trennung ist (vgl. 5.2.1.), besteht die **Russel-Saunders-Kopplung ($\boldsymbol{LS}$-**

**Kopplung):** $\boldsymbol{L}$ und $\boldsymbol{S}$ setzen sich vektoriell zum Gesamtdrehimpuls $\boldsymbol{J}$ zusammen. Er ist durch die Quantenzahl $J$ des Gesamtdrehimpulses bestimmt:

$$|\boldsymbol{J}| = \sqrt{J(J+1)}\,\hbar. \tag{13}$$

$J$ heißt **innere Quantenzahl** des Gesamtdrehimpulses. Sie ist mit $S$ ganz- oder halbzahlig.

**Beispiel 5.2.1. Wertevorrat für die innere Quantenzahl $J$**

Für $L \geqq S$ nimmt $J$ die Werte

$$L + S, L + S - 1, \ldots, L - S \tag{13a}$$

an. Dagegen ist der Wertevorrat $J$ für $L \leqq S$ durch

$$S + L, S + L - 1, \ldots, S - L \tag{13b}$$

gegeben.

4. Der Gesamtdrehimpuls $\boldsymbol{J}$ stellt sich so gegen das äußere Feld $\boldsymbol{H}$ ein, daß seine Komponente in Feldrichtung mit $J$ ganz- oder halbzahlige positive oder negative Vielfache von $\hbar$ annimmt:

$$J_z = M_J\hbar \quad \text{bzw.} \quad \boldsymbol{J}\cdot\boldsymbol{B} = M_J\hbar B \quad (M_J = J, J-1, \ldots, -J). \tag{14}$$

Die Größe $r = 2S + 1$ wird als **Multiplizität** eines Terms bezeichnet und dem Termsymbol vorangestellt. Den $J$-Wert fügt man als Index an. Die Hauptquantenzahl $n$ wird häufig vor dem Termsymbol geschrieben. Eine Multiplizitätskomponente wird somit gemäß

$$n\ {}^{2S+1}L_J \quad \text{bzw.} \quad {}^{2S+1}L_J$$

dargestellt.

**Beispiel 5.2.2. Multiplett-Komponente**

$L = 3$ wird durch F gekennzeichnet. Zu $S = 2$ gehören bei Russel-Saunders-Kopplung Quantenzahlen $J = 5, 4, 3, 2, 1$ und dementsprechend die Terme

$${}^5\mathrm{F}_1, {}^5\mathrm{F}_2, {}^5\mathrm{F}_3, {}^5\mathrm{F}_4, {}^5\mathrm{F}_5.$$

Im Falle $L \leqq S$ liegt nur eine Aufspaltung in $2L + 1$ Terme vor. Die Multiplizität ist nicht voll entwickelt. Da der physikalische Charakter eines Terms vom Gesamtspin $\boldsymbol{S}$ abhängt, spricht man trotzdem von der Multiplizität $2S + 1$.

**Beispiel 5.2.3. Multiplizität und Zahl der Komponenten**

Für den Helium-Term ${}^3\mathrm{S}_1$ ist $L = 0$, $S = 1$, $J = 1$. Weitere Komponenten ${}^3\mathrm{S}_J$ sind nicht möglich. Trotzdem wird in diesem Fall von einem Triplettsystem gesprochen.

5. In einem starken Magnetfeld wird die Russel-Saunders-Kopplung der Vektoren $\boldsymbol{L}$ und $\boldsymbol{S}$ aufgehoben. Jeder dieser beiden Vektoren stellt sich im äußeren Feld so ein, daß für $\boldsymbol{L}$ die Komponente in Feldrichtung $\boldsymbol{H}$ ganzzahlige positive oder negative, für $\boldsymbol{S}$ je nach $S$ ganzzahlige bzw. halbzahlige positive oder negative Vielfache von $\hbar$ annimmt.

Die Aufhebung der Russel-Saunders-Kopplung für starke Magnetfelder bewirkt den Paschen-Back-Effekt. Er tritt auf, wenn die Frequenzaufspaltung $\Delta f$ durch den normalen Zeeman-Effekt groß gegenüber der natürlichen Linienaufspaltung $\Delta f_0$ infolge der Multiplettstruktur ist.

*Auswahlregeln*

Wie aus der Quantenmechanik folgt, sind zwischen den Energieniveaus für $LS$-Kopplung (Russel-Saunders-Kopplung) Übergänge nur erlaubt für

$$\Delta J = 0, \pm 1 \qquad \text{mit Ausnahme} \qquad J = 0 \rightarrow J = 0, \tag{15}$$

ferner

$$\Delta L = 0, \pm 1, \tag{15a}$$

$$\Delta S = 0. \tag{15b}$$

Die Auswahlregel (15) gilt streng. Die andern beiden werden stellenweise verletzt. Für Licht mit senkrecht zum äußeren Feld schwingendem elektrischem Vektor ($\sigma$-Komponente) gilt

$$\Delta M_J = \pm 1. \tag{16}$$

Licht mit parallel zum äußeren Feld schwingendem elektrischem Vektor ($\pi$-Komponente) muß

$$\Delta M_J = 0 \qquad \text{mit Ausnahme} \qquad M_J = 0 \rightarrow M_J = 0 \tag{17}$$

erfüllen.
In Feldrichtung betrachtet, sind die $\sigma$-Komponenten zirkular polarisiert (vgl. 5.2.3.).
Bei starken Feldern gilt die Auswahlregel

$$\Delta l = \pm 1 \qquad \text{bzw.} \qquad \Delta L = \pm 1. \tag{18}$$

## P Probleme

### 5.2.1. Moseleysches Gesetz der Röntgenspektren

Die Spektren der Atome mit mittleren und höheren Kernladungszahlen liegen im Röntgenbereich. Röntgenspektren unterscheiden sich von den sichtbaren und ultravioletten Spektren durch das Fehlen von Absorptionslinien. Es treten kontinuierliche Absorptionsspektren auf, die nach der langwelligen Seite hin durch eine **Kante** begrenzt sind.
Zur Deutung geht man davon aus, daß die Elektronen in Schalen angeordnet sind. Die innerste Schale mit $n = 1$ heißt **K-Schale.**
Nach den Gesetzen der Elektrostatik schirmen die Elektronen die Kernladung nach außen ab. Anstelle der Kernladungszahl $Z$ ist daher die um die Abschirmzahl $s_n$ verminderte Größe

$$Z_{\text{eff}} = Z - s_n \tag{1}$$

zu verwenden. Sie heißt **effektive Kernladungszahl.** Für die Elektronen der K-Schale kann $s_n = 1$ gesetzt werden.

Erklären Sie das Auftreten der Absorptionskanten bei den Röntgenspektren und stellen Sie die Formel für die Frequenz beim Übergang von der L-Schale ($n = 2$) zur K-Schale auf ($K_\alpha$-Linie). Welche $K_\alpha$-Frequenz wird durch das Rubidiumatom ausgestrahlt ($Z = 37$)?

**Lösung:**

Ein Elektron aus einer inneren Schale kann im allgemeinen nur an der äußeren Peripherie angeordnet werden, da die Plätze in den übrigen Schalen besetzt sind. Die Energie für einen derartigen Übergang entspricht der Ionisierungsenergie. Darüber hinaus kann das Elektron einen beliebigen kontinuierlichen Energiebeitrag aus dem Feld aufnehmen und in kinetische Energie umsetzen. Es tritt daher ein kontinuierliches Absorptionsspektrum mit scharfer Kante auf. Die Lücke in der K-Schale wird von einem Elektron aus den höheren Schalen besetzt. Auf dieses wirkt in der K-Schale die elektrostatische Anziehungskraft

$$F_e = -\frac{(Z-1)\,e^2}{4\pi\varepsilon_0 r^2}. \tag{2}$$

Als Frequenz der Spektrallinie beim Übergang zwischen der K- und der L-Schale erhält man damit analog (5.1.1./13)

$$f(K_\alpha) = (Z-1)^2\,\bar{R}\left(\frac{1}{1^2} - \frac{1}{2^2}\right) = \frac{3}{4}\,(Z-1)^2\,\bar{R} \tag{3}$$

bzw.

$$\boxed{\frac{1}{\lambda} = \frac{3}{4}\,(Z-1)^2\,R}. \tag{4}$$

Für $Z = 37$ folgt mit $\bar{R} = R_\infty$

$$f(K_\alpha) = \frac{3}{4}\cdot 36^2 \cdot 3{,}29 \cdot 10^{15}\ \text{Hz} = 3{,}2 \cdot 10^{18}\ \text{Hz}.$$

Der Elektronenspin wird ebensowenig berücksichtigt wie die relativistische Massenveränderichkeit. (4) stellt daher nur eine grobe Näherung dar.

### 5.2.2. Feinstruktur des Wasserstoffspektrums

Die Feinstruktur der $H_\alpha$-Linie des Wasserstoffatoms ($n = 3 \to n = 2$) zeigt eine Aufspaltung in fünf einzelne Linien (vgl. Bild 5.2.4). Die Quantentheorie nach 5.1.2. ergibt nur eine Abhängigkeit des Energieniveaus $W$ von der Hauptquantenzahl $n$; vgl. (5.1.2./13). Nach der **relativistischen Theorie von Dirac** erhält man für die Eigenwerte der Energie eines wasserstoffähnlichen Atoms mit $Z$ Kernladungen

$$W_1^* = \frac{mc^2}{\sqrt{1 + \dfrac{\alpha^2 Z^2}{\left(n_r + \sqrt{(l+1)^2 - \alpha^2 Z^2}\right)^2}}} \tag{1}$$

und

$$W_2^* = \frac{mc^2}{\sqrt{1 + \dfrac{\alpha^2 Z^2}{\left(n_r + \sqrt{l^2 - \alpha^2 Z^2}\right)^2}}}. \tag{2}$$

Darin kennzeichnen $n_r = 0, 1, 2, \ldots$ (radiale Quantenzahl) und $l = 0, 1, 2, \ldots$ voneinander unabhängige Quantenzahlen. Die Größe

$$\boxed{\alpha = \frac{e^2}{2\varepsilon_0 ch}} \tag{3}$$

heißt **Sommerfeldsche Feinstrukturkonstante.**

Leiten Sie aus den Eigenwerten (1) und (2) die Feinstruktur der $H_\alpha$-Linie ab. Welches Auflösungsvermögen ist zur Trennung der Linien erforderlich? Die Wellenlänge der $H_\alpha$-Linie des Wasserstoffes berechnet sich nach (5.1./7) zu $\lambda = 656{,}3$ nm.

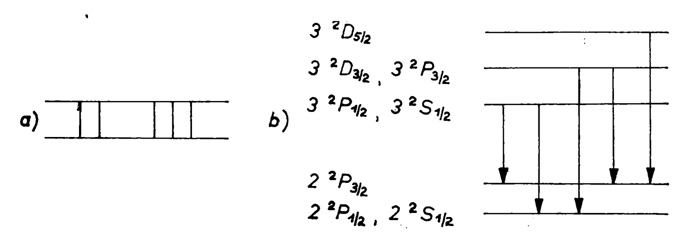



Bild 5.2.4. Feinstruktur der $H_\alpha$-Linie. a) Liniensystem, b) Übergänge

**Lösung:**

Die SOMMERFELDsche Feinstrukturkonstante hat nach (3) den Wert

$$\boxed{\alpha = \frac{(1{,}602 \cdot 10^{-19})^2}{2 \cdot 8{,}854 \cdot 10^{-12} \cdot 2{,}9979 \cdot 10^8 \cdot 6{,}6262 \cdot 10^{-34}} = 7{,}296 \cdot 10^{-3} = \frac{1}{137{,}1}}\,. \tag{4}$$

Man kann daher (1) und (2) entwickeln:

$$W_{1,2}^* = mc^2 + W_{1,2} \tag{5}$$

mit

$$W_1 = -\frac{Z^2e^4m}{8\varepsilon_0{}^2h^2\left(n_r + \sqrt{(l+1)^2 - \alpha^2Z^2}\right)^2}\left(1 - \frac{Z^2\alpha^2}{4\left(n_r + \sqrt{(l+1)^2 - \alpha^2Z^2}\right)^2}\right), \tag{6}$$

$$W_2 = -\frac{Z^2e^4m}{8\varepsilon_0{}^2h^2\left(n_r + \sqrt{l^2 - \alpha^2Z^2}\right)^2}\left(1 - \frac{Z^2\alpha^2}{4\left(n_r + \sqrt{l^2 - \alpha^2Z^2}\right)^2}\right). \tag{7}$$

Wir vergleichen in (6) und (7) den ersten Summanden mit (5.1./19). Wegen $\alpha^2 \ll 1$ wird beim Wasserstoffatom bis auf das Glied $\alpha^2Z^2$ in (6) Übereinstimmung für

$$n = n_r + l + 1, \tag{6a}$$

dagegen in (7) für

$$n = n_r + l \tag{7a}$$

erzielt. Wir führen daher die Quantenzahl $j$ des Gesamtdrehimpulses ein und setzen in (6)

$$j = j_1 = l + \frac{1}{2}, \tag{8a}$$

in (7)

$$j = j_2 = l - \frac{1}{2}. \tag{8b}$$

Damit erhalten wir einheitlich

$$W = -\frac{Z^2 e^4 m}{8\varepsilon_0{}^2 h^2 \left(n_r + \sqrt{\left(j + \frac{1}{2}\right)^2 - \alpha^2 Z^2}\right)^2} \times \left(1 - \frac{Z^2 \alpha^2}{4\left(n_r + \sqrt{\left(j + \frac{1}{2}\right)^2 - \alpha^2 Z^2}\right)^2}\right) \tag{9}$$

mit dem Wertevorrat für $j$

$$j = l - \frac{1}{2}, l + \frac{1}{2} \tag{10}$$

und der Hauptquantenzahl

$$n = n_r + j + \frac{1}{2}. \tag{11}$$

In der Halbzahligkeit der inneren Quantenzahl $j$ kommt der Einfluß des **Elektronenspins** zum Ausdruck.

Für die Eigenwerte $W$ der Energie folgt aus (9) durch Reihenentwicklung

$$W = -\frac{Z^2 Rch}{n^2}\left[1 + \frac{\alpha^2 Z^2}{n}\left(\frac{1}{j + \frac{1}{2}} - \frac{1}{4n}\right)\right]. \tag{12}$$

Es besteht danach bei der Aufspaltung der Energieterme nur noch eine Abhängigkeit von der Quantenzahl $j$. Nach (5.2./15) lautet die Übergangsregel

$$\Delta j = 0, \pm 1. \tag{13}$$

Sie ergibt für die $H_\alpha$-Linie fünf Übergänge $3^2S_{1/2} \to 2^2P_{3/2}$, $3^2P_{1/2} \to 2^2S_{1/2}$, $3^2S_{1/2} \to 2^2P_{1/2}$, $3^2D_{3/2} \to 2^2P_{3/2}$, $3^2D_{5/2} \to 2^2P_{3/2}$ in Übereinstimmung mit dem Experiment. Für $n = 3 \to n = 2$ erhält man mit $Z = 1$ als Abweichung der Wellenzahlen von den Balmer-Termen

$$\Delta \frac{f}{c} = \Delta \frac{1}{\lambda} = \left|\frac{\Delta\lambda}{\lambda^2}\right| = \alpha^2 R\left[\frac{1}{2^3}\left(\frac{1}{j_e + \frac{1}{2}} - \frac{1}{2}\right) - \frac{1}{3^3}\left(\frac{1}{j_a + \frac{1}{2}} - \frac{1}{3}\right)\right]. \tag{14}$$

Darin bedeutet $\lambda$ die Wellenlänge der $H_\alpha$-Linie.

Um $3^2D_{5/2} \to 2^2P_{3/2}$ von $3^2D_{3/2} \to 2^2P_{3/2}$ zu trennen, hat man den Wellenlängenabstand

$$\begin{aligned}(\Delta\lambda)_{3/2,5/2} - (\Delta\lambda)_{3/2,3/2} &= \lambda^2\left[\left(\frac{\Delta f}{c}\right)_{3/2,5/2} - \left(\frac{\Delta f}{c}\right)_{3/2,3/2}\right] \\ &= (656{,}3 \cdot 10^{-9})^2 \cdot (7{,}298 \cdot 10^{-3})^2 \cdot 1{,}098 \cdot 10^7\ \mathrm{m} \\ &\quad \times \left\{\left[\frac{1}{2^3}\left(\frac{1}{2} - \frac{1}{2}\right) - \frac{1}{3^3}\left(\frac{1}{3} - \frac{1}{3}\right)\right]\right. \\ &\quad \left. - \left[\frac{1}{2^3}\left(\frac{1}{2} - \frac{1}{2}\right) - \frac{1}{3^3}\left(\frac{1}{2} - \frac{1}{3}\right)\right]\right\} \\ &= 1{,}6 \cdot 10^{-12}\ \mathrm{m}\end{aligned}$$

aufzulösen. Hierfür ist ein Spektralapparat mit dem Auflösungsvermögen

$$\frac{\lambda}{\Delta\lambda} = \frac{656{,}3 \cdot 10^{-9}\,\text{m}}{1{,}6 \cdot 10^{-12}\,\text{m}} = 4{,}1 \cdot 10^5$$

erforderlich.

### 5.2.3. Das Spektrum der Alkali-Atome

Bei den Spektren der Elemente höherer Ordnung ist die **Balmersche Termform**

$$W = \frac{Z_{\text{eff}}^2 Rch}{n^2} \tag{1}$$

nicht mehr ausreichend. Wie aus (5.2.2./12) hervorgeht, bedingen der Spin und die relativistische Theorie von Dirac Zusatzglieder, die mit wachsender Ordnungszahl des Atoms nicht mehr zu vernachlässigen sind.
Anstelle des einfachen Balmer-Terms treten Terme der Form

$$W = \frac{Z_{\text{eff}}^2 Rch}{(n + a_n)^2} \tag{2}$$

auf. Sie heißen **Rydberg-Terme.** Für die Korrekturglieder schreibt man

$$a_1 = s,\ a_2 = p,\ a_3 = d,\ \ldots . \tag{3}$$

Bei den Spektren der Alkaliatome ist für $n = 1$

$$a_1 = s = 0{,}77 \tag{4}$$

zu setzen. Entsprechend den zwei möglichen Werten von $j$ treten nach (5.2.2./14) für $n = 2$ zwei Werte auf, und zwar

$$a_{21} = p_1 = p = 0{,}235, \qquad a_{22} = p_2 = p - \Delta p = 0{,}232, \qquad \Delta p = 0{,}003. \tag{5}$$

Berechnen Sie daraus die Wellenzahldifferenz der beiden Quantenübergänge

$$2^2\text{P}_{1/2} \rightarrow 1^2\text{S}_{1/2}, \qquad 2^2\text{P}_{3/2} \rightarrow 1^2\text{S}_{1/2}.$$

Welches Auflösungsvermögen ist zur Trennung der Linien erforderlich?

**Lösung:**

Für die Frequenz der beiden ausgestrahlten Spektrallinien des Dubletts erhält man nach (2) und (3)

$$f_i = \frac{\Delta W}{h} = RZ_{\text{eff}}^2 c \left(\frac{1}{(1-s)^2} - \frac{1}{(2-p_i)^2}\right) \qquad (i = 1, 2). \tag{6}$$

Der Frequenzabstand des Dubletts beträgt daher

$$\Delta f = f_1 - f_2 = RZ_{\text{eff}}^2 c \left(\frac{1}{(2-p_2)^2} - \frac{1}{(2-p_1)^2}\right). \tag{7}$$

Hieraus ergibt sich angenähert für den Wellenlängenabstand

$$\Delta\lambda = -RZ_{\text{eff}}^2 \lambda^2 \left(\frac{1}{(2-p_1)^2} - \frac{1}{(2-p_2)^2}\right) = 4RZ_{\text{eff}}^2 \lambda^2 \frac{\Delta p}{(2-p)^4}. \tag{8}$$

Daraus erhält man für die Wellenlänge

$$\lambda = \frac{1}{RZ_{\text{eff}}^2 \left(\frac{1}{(1-s)^2} - \frac{1}{(2-p)^2}\right)}, \tag{9}$$

während für das Auflösungsvermögen

$$\frac{\lambda}{\Delta\lambda} = \frac{(2-p)^4}{4\,\Delta p} \left(\frac{1}{(1-s)^2} - \frac{1}{(2-p)^2}\right) \tag{10}$$

folgt. Wir setzen die vorgegebenen Zahlen ein und erhalten

$$\frac{\lambda}{\Delta\lambda} = \frac{1{,}765^4}{4 \cdot 0{,}003} \left(\frac{1}{0{,}23^2} - \frac{1}{1{,}765^2}\right) = 1{,}5 \cdot 10^4.$$

## 5.2.4. Normaler Zeeman-Effekt

Wasserstoff befindet sich in einem Magnetfeld mit der Flußdichte $B = 1\ \mathrm{V\,s\,m^{-2}}$. Die Beobachtung des Spektrums erfolge einmal parallel, einmal senkrecht zum äußeren Feld. Untersuchen Sie die Wirkung des Magnetfeldes bei der Emission der Spektrallinien und vergleichen Sie die Linienaufspaltung mit dem Wellenzahlabstand $\Delta \frac{1}{\lambda} = 17{,}2\ \mathrm{cm^{-1}}$ der beiden Linien des Natriumdubletts. Wie sind die Linien polarisiert?

**Lösung:**

Beim Einschalten des Magnetfeldes wird entsprechend der MAXWELLschen Gleichung $\dot{\boldsymbol{B}} = -\operatorname{rot} \boldsymbol{E}$ ein elektrischer Wirbel erzeugt, aus dem die Energieänderung berechnet werden kann. Wir legen im folgenden die $z$-Achse in Richtung des magnetischen Feldes. Es werde angenommen, $\boldsymbol{B}$ wachse linear an, bis der volle Wert erreicht ist. In der Zeit des Anwachsens von $\boldsymbol{B}$ führe das Elektron $N$ Umläufe aus. Dann erhält man nach dem STOKESschen Satz (vgl. [4] (1.3./10)) für den Energiezuwachs

$$\Delta W = -Ne \oint \boldsymbol{E} \cdot \mathrm{d}\boldsymbol{s} = -N \iint_{\Delta A} \operatorname{rot} \boldsymbol{E} \cdot \mathrm{d}\boldsymbol{A} = eN \iint_{\Delta A} \dot{\boldsymbol{B}} \cdot \mathrm{d}\boldsymbol{A}. \tag{1}$$

Bezeichnet $\Delta t$ die Zeit für einen Elektronenumlauf, kann man

$$\dot{B} = \frac{B}{N\,\Delta t} \tag{2}$$

einsetzen, und es ergibt sich

$$\Delta W = \frac{eB\,\Delta A}{\Delta t}. \tag{3}$$

Das Produkt aus Stromstärke und umfahrener Fläche ist gleich dem magnetischen Moment (vgl. [4] 1.2.):

$$\boldsymbol{m}_{\mathrm{m}} = \frac{-e}{\Delta t}\,\Delta\boldsymbol{A}. \tag{4}$$

Es folgt

$$\Delta W = -\boldsymbol{m}_{\mathrm{m}} \cdot \boldsymbol{B}. \tag{5}$$

Nach (5.2./4) ist das magnetische Moment $\boldsymbol{m}_{\mathrm{m}} = \boldsymbol{m}_L$ mit dem Drehimpuls $\boldsymbol{L}$ gemäß

$$\boldsymbol{L} = -\frac{2m_{\mathrm{e}}}{e}\boldsymbol{m}_L \tag{6}$$

verknüpft. Setzt man das BOHRsche Magneton

$$\mu_{\mathrm{B}} = \frac{e\hbar}{2m_{\mathrm{e}}} \tag{7}$$

ein, ergibt sich aus (5) und (6)

$$\Delta W = \frac{e}{2m_{\mathrm{e}}}\boldsymbol{L}\cdot\boldsymbol{B} = \frac{e}{2m_{\mathrm{e}}}L_z B\hbar = m\mu_{\mathrm{B}}B. \tag{8}$$

Darin bedeutet $m = L_z$ die magnetische Quantenzahl gemäß (5.1./21). Um Quantenübergänge $\Delta m = m_{\mathrm{e}} - m_{\mathrm{a}}$ bestimmen zu können, wird die Bewegung des Elektrons betrachtet.
Es bewege sich im Atom bei fehlendem äußeren Feld mit der Kreisfrequenz $\omega_0$. Kennzeichnet $\boldsymbol{r} = (x, y, z)$ seinen Ortsvektor, so wirkt im Feld die Kraft $-e\dot{\boldsymbol{r}}\times\boldsymbol{B}$. Daraus ergibt sich die Bewegungsgleichung

$$m\ddot{\boldsymbol{r}} + m\omega_0^2\boldsymbol{r} = -e\dot{\boldsymbol{r}}\times\boldsymbol{B}. \tag{9}$$

Wir lösen nach den Komponenten auf und erhalten in Richtung des äußeren Feldes

$$\ddot{z} + \omega_0^2 z = 0 \tag{10}$$

mit der Lösung

$$z = z_0\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega_0 t}. \tag{10a}$$

In Feldrichtung findet somit keine Beeinflussung der Elektronenbewegung statt. Die Kreisfrequenz bleibt ungeändert:

$$\omega = \omega_{\parallel\boldsymbol{B}} = \omega_0. \tag{11}$$

Für die Bewegung senkrecht zur Feldrichtung faßt man zusammen:

$$s = x \pm \mathrm{i}y. \tag{12}$$

Aus (9) folgt die Differentialgleichung

$$\ddot{s} \mp \mathrm{i}\frac{e}{m}B\dot{s} + \omega_0^2 s = 0. \tag{13}$$

Sie wird durch den Ansatz einer zirkular polarisierten Schwingung

$$s = s_0\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega t} \tag{14}$$

gelöst. Durch Einsetzen in (13) ergibt sich

$$-\omega^2 \pm \frac{e}{m}B\omega + \omega_0^2 = 0. \tag{15}$$

$\omega$ und $\omega_0$ liegen in der Größenordnung des sichtbaren Lichtes bei $10^{15}$ Hz. Der zweite Summand in (15) wird gleich

$$\frac{1{,}60\cdot 10^{-19}}{9{,}11\cdot 10^{-31}}\cdot 10^{15}\ \mathrm{Hz} = 1{,}76\cdot 10^{26}\ \mathrm{Hz}.$$

Das ist klein gegen die andern beiden Summanden. $\omega$ und $\omega_0$ sind daher nahezu gleich, und es kann angenähert

$$\frac{e}{m} B\omega \approx \frac{e}{m} B\omega_0 \tag{16}$$

gesetzt werden. Die Wurzeln der Gleichung (15) lauten damit

$$\omega_{1,2} = \omega^{1,2}_{\perp B} = \sqrt{\omega_0{}^2 \pm \frac{e}{m} B\omega_0} \quad \text{bzw.} \quad \boxed{\omega^{1,2}_{\perp B} = \omega_0 \pm \frac{1}{2} \frac{e}{m} B}\,. \tag{17}$$

Bei **longitudinaler Beobachtung** (in Feldrichtung blickend) kann die Elektronenschwingung (10) parallel zum Magnetfeld als Oszillation eines elektrischen Dipols aufgefaßt werden. Ein elektrischer Dipol strahlt nicht in seiner Schwingungsrichtung. Die Schwingung mit der Kreisfrequenz $\omega_0$ tritt daher nicht in Erscheinung. Dagegen sind die nach (14) in der Ebene senkrecht zum äußeren Feld ablaufenden Schwingungen mit zwei zirkular polarisierten Lichtwellen verknüpft. Ihre elektrischen Vektoren schwingen senkrecht zur Feldrichtung ($\sigma$-Komponente) und sind um

$$\Delta f = \pm \frac{1}{4\pi} \frac{e}{m} B \tag{18}$$

gegen die Frequenz der ursprünglichen Schwingung verschoben. Bei longitudinaler Beobachtung ist daher am Ort der ursprünglichen Spektrallinie kein Licht zu beobachten. Symmetrisch rechts und links davon treten zwei Linien auf, die, entgegengesetzt rotierend, zirkular polarisiert sind (vgl. Bild 5.2.1). Für die Verschiebung der Energieniveaus erhält man

$$\Delta W = h\,\Delta f = \pm \mu_B B. \tag{19}$$

Diese Formeln stehen in Übereinstimmung mit (8), wenn nur Übergänge

$$(\Delta m)_{\sigma,\text{zirkular}} = \pm 1 \tag{20}$$

zugelassen werden.

Bei transversaler Beobachtung (senkrecht zum Magnetfeld), z. B. in Richtung der $y$-Achse, scheidet die Schwingung in dieser Richtung als nicht beobachtbar aus. Dagegen strahlt die $z$-Komponente mit vollem Betrag. Die ohne Magnetfeld auftretende Spektrallinie bleibt auch nach Einschalten des Feldes erhalten. Sie stammt nach (10) von der Schwingung parallel zum äußeren Feld:

$$(\Delta m)_\pi = 0. \tag{21}$$

Senkrecht zum äußeren Feld und zur Beobachtungsrichtung schwingt das elektrische Feld nach (17) mit der Frequenzverschiebung (18). Da die $y$-Komponente fehlt, ist die Intensität der beiden verschobenen Linien nur halb so groß wie die in der Mitte. Der Vergleich mit (8) zeigt

$$(\Delta m)_\sigma = \pm 1. \tag{22}$$

Für die Verschiebung in Wellenzahlen erhält man

$$\Delta \frac{1}{\lambda} = \frac{\Delta f}{c} = \pm \frac{eB}{4\pi mc}, \tag{23}$$

mit den vorgegebenen Werten

$$\Delta \frac{1}{\lambda} = \frac{1{,}60 \cdot 10^{-19} \cdot 1}{4\pi \cdot 9{,}11 \cdot 10^{-31} \cdot 3 \cdot 10^8}\,\text{m}^{-1} = 46{,}6\ \text{m}^{-1},$$

d. h. knapp das Dreifache des Abstandes der beiden D-Linien.

## 5.2.5. Anomaler Zeeman-Effekt

Untersuchen Sie die Aufspaltung der Energieniveaus in einem schwachen Magnetfeld a) für ein Einelektronensystem (Alkaliatom), b) für ein Zweielektronensystem (Erdalkaliatom). Berechnen Sie die Aufspaltung der beiden D-Linien des Natriums für $B = 2\ \mathrm{V\,s\,m^{-2}}$.

**Lösung:**

Die magnetische Zusatzenergie folgt gemäß (5.2.4./5)

$$\Delta W = -\boldsymbol{m}_\mathrm{m} \cdot \boldsymbol{B}. \tag{1}$$

Der Gesamtdrehimpuls $\boldsymbol{J}$ setzt sich aus dem Bahndrehimpuls $\boldsymbol{L}$ und dem Eigendrehimpuls $\boldsymbol{S}$ gemäß Bild 5.2.5 zusammen. Dieses Vektorgerüst rotiert um $\boldsymbol{H}$. Bei der Berechnung von $\boldsymbol{m}_\mathrm{m}$ ist die Anomalie des Elektronenspins zu berücksichtigen.

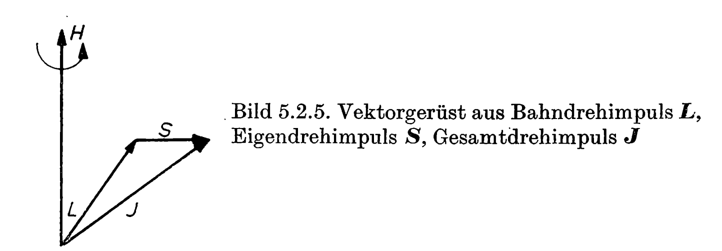



Bild 5.2.5. Vektorgerüst aus Bahndrehimpuls $\boldsymbol{L}$, Eigendrehimpuls $\boldsymbol{S}$, Gesamtdrehimpuls $\boldsymbol{J}$

Nach (5.2./8) folgt

$$\boldsymbol{m}_\mathrm{m} = \boldsymbol{m}_J = -\frac{\mu_\mathrm{B}}{\hbar}(\boldsymbol{L} + 2\boldsymbol{S}) = -\frac{\mu_\mathrm{B}}{\hbar}(\boldsymbol{J} + \boldsymbol{S}). \tag{2}$$

Wegen (5.2./11a) und (5.2./12a) ergibt sich

$$|\boldsymbol{m}_J| = \left|\sqrt{J(J+1)} + \sqrt{S(S+1)}\cos(\boldsymbol{S}, \boldsymbol{J})\right| \mu_\mathrm{B}. \tag{3}$$

Der Cosinussatz besagt

$$\boldsymbol{L}^2 = \boldsymbol{S}^2 + \boldsymbol{J}^2 - 2|\boldsymbol{S}|\,|\boldsymbol{J}|\cos(\boldsymbol{S}, \boldsymbol{J}). \tag{4}$$

Wir lösen nach $\cos(\boldsymbol{S}, \boldsymbol{J})$ auf und drücken die Beträge der Vektoren durch die Quantenzahlen aus:

$$\cos(\boldsymbol{S}, \boldsymbol{J}) = \frac{J(J+1) + S(S+1) - L(L+1)}{2\sqrt{S(S+1)\,J(J+1)}}. \tag{5}$$

Durch Einsetzen in (3) erhalten wir

$$|\boldsymbol{m}_J| = g_J \mu_\mathrm{B} \sqrt{J(J+1)} = g_J \frac{\mu_\mathrm{B}}{\hbar} |\boldsymbol{J}|. \tag{6}$$

Hierin heißt

$$g_J = 1 + \frac{J(J+1) + S(S+1) - L(L+1)}{2J(J+1)} \tag{7}$$

**Landé-Faktor.**
Für die magnetische Zusatzenergie folgt nach (5.2./14)

$$\Delta W = g_J \mu_\mathrm{B} \sqrt{J(J+1)}\, B \cos(\boldsymbol{J}, \boldsymbol{B}) = g_J \mu_\mathrm{B} M_J B. \tag{8}$$

Darin bedeutet $M_J$ die magnetische Quantenzahl mit dem Wertevorrat

$$M_J = -J, \ldots, +J.$$

Für $\pi$-Komponenten bei transversaler Beobachtung ist analog dem normalen ZEEMAN-Effekt

$$(\Delta M_J)_\pi = 0 \tag{9}$$

und daher (a Anfangs-, e Endzustand)

$$\Delta\lambda = -\frac{\lambda^2}{c}\Delta f = \frac{\lambda^2 \mu_B B M_J (g_e - g_a)}{ch}. \tag{10}$$

Für die $\sigma$-Komponenten ergibt sich wegen $\Delta M_J = M_e - M_a = \pm 1$

$$\Delta\lambda = \frac{\lambda^2 \mu_B B}{ch}(M_e g_e - M_a g_a). \tag{11}$$

Beim Einelektronensystem ist

$$L = l, \quad J = j, \quad S = |s| = \frac{1}{2}, \quad M_J = m. \tag{12}$$

Im Falle des $\sigma$-Terms mit $L = l = 0$ kommt für $J = j$ nur der Wert 1/2 in Frage. Damit erhält man aus (7)

$$g_J = 1 + \frac{\frac{1}{2}\cdot\frac{3}{2} + \frac{1}{2}\cdot\frac{3}{2}}{2\cdot\frac{1}{2}\cdot\frac{3}{2}} = 2,$$

ferner

$$m_j = M_J = \frac{1}{2} \quad \text{bzw.} \quad m_j = M_J = -\frac{1}{2};$$

$$M_J g_J = \frac{1}{2}\cdot 2 = 1 \quad \text{bzw.} \quad M_J g_J = -\frac{1}{2}\cdot 2 = -1.$$

In gleicher Weise kann die anomale ZEEMAN-Aufspaltung für die übrigen Terme berechnet werden und ergibt die in Tabelle 5.2.1 zusammengestellten Daten.
Für das Zweielektronensystem ist zwischen Parazuständen mit zueinander entgegengerichteten Spinvektoren und Orthozuständen mit gleichgerichteten Spins zu unterscheiden. Für Parazustände ist $S = 0$, für Orthozustände $S = 1$. Dementsprechend erhält man die Daten nach Tab. 5.2.2.
Die **$D_1$-Linie des Natriumatoms** geht aus dem Übergang

$$2^2p_{1/2} \to 1^2s_{1/2}, \tag{13}$$

die $D_2$-Linie aus

$$2^2p_{3/2} \to 1^2s_{1/2} \tag{14}$$

hervor (vgl. Bild 5.2.6).
Das $^2p_{1/2}$-Niveau spaltet nach Tab. 5.2.1 in zwei, das $^2s_{1/2}$-Niveau ebenfalls in zwei Terme auf. Die $D_1$-Linie wird daher in ein Quartett aufgespalten.
Für das $^2p_{3/2}$-Niveau erhält man vier Terme. Da zwei Übergänge entfallen $\left(\frac{1}{2} \to -\frac{3}{2}, -\frac{1}{2} \to \frac{3}{2}\right)$, für die die Auswahlregeln nicht erfüllt sind, verbleiben nach Bild 5.2.6 sechs Linien.

Für die $D_1$-Linie ($\lambda = 589{,}593$ nm) erhalten wir

$$\frac{\lambda^2 \mu_B B}{ch} = \frac{589{,}6^2 \cdot 10^{-18} \cdot 9{,}274 \cdot 10^{-24} \cdot 2{,}0}{2{,}998 \cdot 10^8 \cdot 6{,}626 \cdot 10^{-34}} \text{ m} = 3{,}246 \cdot 10^{-11} \text{ m},$$

für die $D_2$-Linie ($\lambda = 588{,}997$ nm) in gleicher Weise $3{,}2239 \cdot 10^{-11}$ m. Mit den Werten nach Tab. 5.2.3 erhält man für die $D_1$-Linie

$$(\Delta\lambda)_\pi = \pm \frac{2}{3} \cdot 3{,}246 \cdot 10^{-11} \text{ m} = 2{,}164 \cdot 10^{-11} \text{ m}, \quad (\Delta\lambda)_\sigma = \pm 4{,}328 \cdot 10^{-11} \text{ m};$$

für die $D_2$-Linie

$$(\Delta\lambda)_\pi = \pm \frac{1}{3} \cdot 3{,}2239 \cdot 10^{-11} \text{ m} = \pm 1{,}075 \cdot 10^{-11} \text{ m}, \quad (\Delta\lambda)_\sigma = \begin{cases} \pm 3{,}225 \cdot 10^{-11} \text{ m} \\ \pm 5{,}375 \cdot 10^{-11} \text{ m}. \end{cases}$$

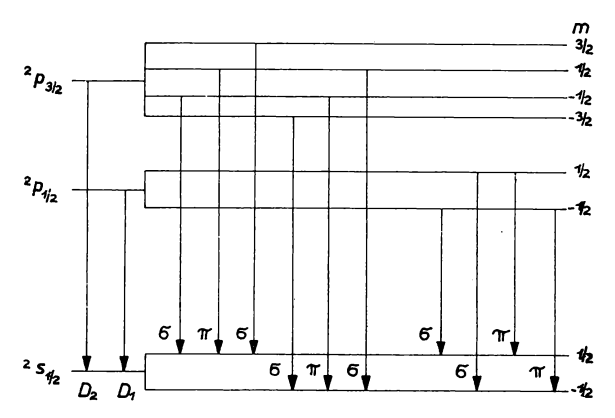



Bild 5.2.6. Schema der Übergänge beim anomalen ZEEMAN-Effekt der beiden D-Linien des Natriums

## 5.2.6. Paschen-Back-Effekt

Untersuchen Sie die Aufspaltung der Terme eines Ein- und eines Zweielektronensystems in einem starken Magnetfeld. Wie groß muß dieses sein, wenn für die beiden D-Linien des Natriums der PASCHEN-BACK-Effekt eintreten soll?

**Lösung:**

Die RUSSEL-SAUNDERS-Kopplung ist aufgehoben. $\boldsymbol{L}$ und $\boldsymbol{S}$ stellen sich unabhängig voneinander gegen $\boldsymbol{H}$ ein:

$$(\boldsymbol{L})_{\boldsymbol{H}} = M_L \hbar \quad (M_L = 0, \pm 1, \ldots, \pm L), \tag{1}$$

$$(\boldsymbol{S})_{\boldsymbol{H}} = M_S \hbar \quad (M_S = S, S-1, \ldots, -S). \tag{2}$$

Berücksichtigt man die Anomalie des Elektronenspins, so ergibt sich die Zusatzenergie

$$\Delta W = (M_L + 2M_S) \mu_B B = m \mu_B B. \tag{3}$$

In Tab 5.2.4 und 5.2.5 sind die Werte für $M_L + 2M_S$ bei Ein- und Zweielektronensystemen zusammengestellt.

Die Auswahlregeln

$$(\Delta m)_\pi = 0, \qquad (\Delta m)_\sigma = \pm 1 \tag{4}$$

ergeben für die beiden Übergänge (5.2.5./13) und (5.2.5./14) ein System von drei Linien, das dem normalen ZEEMAN-Effekt entspricht. In der Mitte zwischen den beiden D-Linien, bei 589,709 nm, liegt die $\pi$-Komponente. Beide $\sigma$-Komponenten sind dagegen um

$$\Delta\lambda = \pm \frac{\lambda_0^2}{c^2} \frac{\mu_B B}{h} \tag{5}$$

verschoben. Die $\pi$-Komponente wird nach Tab. 5.2.4 durch $m = -1 \to -1$ sowie $1 \to 1$ verursacht. Übergänge $0 \to -1$ bzw. $+1$ sowie $-2$ bzw. $0 \to -1$, $+2$ bzw. $0 \to +1$ erzeugen $\sigma$-Komponenten. In Bild 5.2.3 ist der PASCHEN-BACK-Effekt dargestellt. Der PASCHEN-BACK-Effekt tritt für

$$\Delta f > \Delta f_0 \tag{6}$$

auf. Die Größe der Verschiebung ist durch (5.2.4./23) gegeben. Wir erhalten damit aus (4)

$$\frac{eB}{4\pi m} > \Delta f_0. \tag{7}$$

Der Frequenzabstand der beiden D-Linien beträgt

$$\Delta f_0 = c \left| \frac{\Delta\lambda}{\lambda^2} \right| = \frac{3 \cdot 10^8 \cdot 0{,}596 \cdot 10^{-9}}{(589 \cdot 10^{-9})^2} \text{ Hz} = 5{,}15 \cdot 10^{11} \text{ Hz}.$$

Wir lösen (7) nach $B$ auf und setzen die bekannten Werte ein:

$$B > \frac{4\pi \cdot 9{,}11 \cdot 10^{-31} \cdot 5{,}15 \cdot 10^{11}}{1{,}60 \cdot 10^{-19}} \text{ V s m}^{-2} = 36{,}8 \text{ V s m}^{-2}.$$

Das entspricht der magnetischen Feldstärke

$$H = \frac{B}{\mu_0} = \frac{36{,}8}{1{,}257 \cdot 10^{-6}} \text{ A m}^{-1} = 2{,}9 \cdot 10^7 \text{ A m}^{-1}.$$

## 5.2.7. Hyperfeinstruktur durch Kernspin

Der Atomkern hat den Eigendrehimpuls $\boldsymbol{I}$, der mit dem magnetischen Moment $\boldsymbol{m}_I$ verbunden ist. $\boldsymbol{I}$ tritt gequantelt auf:

$$|\boldsymbol{I}| = I \frac{\hbar}{2}, \qquad I = 0, 1, 2, \ldots. \tag{1}$$

Dagegen zeigen die magnetischen Momente $\boldsymbol{m}_I$ der Kerne keine Quantelung. Schreibt man

$$\boldsymbol{m}_I = g_I \frac{\mu_K}{\hbar} \boldsymbol{I} \tag{2}$$

mit dem Kernmagneton

$$\mu_K = \frac{e\hbar}{2m_p} = \frac{1{,}60 \cdot 10^{-19} \cdot 1{,}05 \cdot 10^{-34}}{2 \cdot 1{,}67 \cdot 10^{-27}} \text{ A m}^2 = 5{,}05 \cdot 10^{-27} \text{ A m}^2, \tag{3}$$

so treten nach Tab. 5.2.6 für $g_I$ alle möglichen Werte auf, die weder halb- noch ganzzahlig sind.

Gesamtdrehimpuls $\boldsymbol{J} = \boldsymbol{L} + \boldsymbol{S}$ und Kernspin $\boldsymbol{I}$ setzen sich zum **Gesamtatomdrehimpuls** $\boldsymbol{F}$ zusammen:

$$\boldsymbol{F} = \boldsymbol{J} + \boldsymbol{I}. \tag{4}$$

$\boldsymbol{J}$ und $\boldsymbol{I}$ präzedieren um $\boldsymbol{F}$ wie $\boldsymbol{L}$ und $\boldsymbol{S}$ um $\boldsymbol{J}$ (vgl. Bild 5.2.7). Dabei gilt

$$|\boldsymbol{F}| = F\frac{\hbar}{2}. \tag{4a}$$

$F$ heißt **Feinstrukturquantenzahl.**

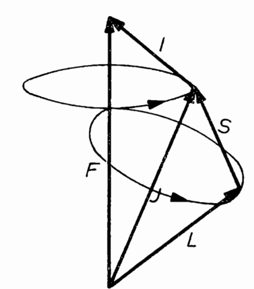



Bild 5.2.7. Vektorgerüst des Atoms
$\boldsymbol{L}$ Gesamtdrehimpuls, $\boldsymbol{S}$ Gesamtspin, $\boldsymbol{J}$ Gesamt-Elektronendrehimpuls, $\boldsymbol{I}$ Kernspin, $\boldsymbol{F}$ Gesamt-Atomdrehimpuls

Im äußeren Feld ist analog (5.2./14)

$$\boldsymbol{F} \cdot \boldsymbol{B} = M_F B\hbar \tag{5}$$

mit dem Wertevorrat

$$M_F = F, F-1, \ldots, -F. \tag{5a}$$

Die Übergangsregel lautet

$$F' = \begin{cases} F+1 \\ F \\ F-1 \end{cases} \quad \Delta F = \pm 1; 0 \tag{6}$$

mit dem Verbot des Überganges $F = 0 \to F' = 0$.
Bestimmen Sie die Energieniveaus der beiden D-Linien des Natriums und ihre Aufspaltung nfolge des Kernspins. Berechnen Sie die Größenordnung dieser Aufspaltung für $B = 200\,\mathrm{V\,s\,m^{-2}}$.

**Lösung:**

Es liegen die gleichen Verhältnisse wie beim anomalen Zeeman-Effekt vor. $\boldsymbol{L}$, $\boldsymbol{S}$, $\boldsymbol{J}$ sind durch $\boldsymbol{J}$, $\boldsymbol{I}$, $\boldsymbol{F}$ zu ersetzen. Im Gegensatz zu $g_J$ ist jedoch bei $g_I$ die fehlende Ganz- oder Halbzahligkeit zu beachten. Außerdem weicht das Kernmagneton um Größenordnungen vom Bohrschen Magneton ab.
Wir beschränken uns anstelle einer Ableitung wie beim anomalen Zeeman-Effekt auf die Abschätzung der Größenordnungen.
Als Wertevorrat der Quantenzahlen $F$ erhalten wir

$$\left.\begin{aligned} F &= J+I,\ \ J+I-1, \ldots, J-I \qquad (J > I), \\ F &= I+J,\ \ I+J-1, \ldots, I-J \qquad (J < I). \end{aligned}\right\} \tag{7}$$

Für den Kernspin des Natriums erhalten wir nach Tab. 5.2.6

$$I_{\mathrm{Na}} = \frac{3}{2}. \tag{8}$$

Die beiden D-Linien ergeben sich aus

$$2^2\mathrm{p}_{1/2} \to 1^2\mathrm{s}_{1/2}(\mathrm{D}_1), \quad 2^2\mathrm{p}_{3/2} \to 1^2\mathrm{s}_{1/2}(\mathrm{D}_2). \tag{9}$$

Zu $J = \frac{1}{2}$, $I = \frac{3}{2}$ erhält man nach (7)

$$F = 2; 1. \tag{10}$$

Dagegen ergibt sich zu $J = \frac{3}{2}$, $I = \frac{3}{2}$

$$F = 3; 2; 1; 0. \tag{11}$$

Der $2^2\mathrm{p}_{1/2}$-Term spaltet in zwei, der $2^2\mathrm{p}_{3/2}$-Term in vier, der $1^2\mathrm{s}_{1/2}$-Term in zwei Hyperfeinterme auf.
Für das magnetische Moment wird

$$\boldsymbol{M}_F = \boldsymbol{M}_J + \boldsymbol{m}_I = -\frac{\mu_\mathrm{B}}{\hbar}(\boldsymbol{L} + 2\boldsymbol{S}) + g_I \frac{\mu_\mathrm{K}}{\hbar}\boldsymbol{I}. \tag{12}$$

Wegen

$$\Delta W_\mathrm{K} = -\boldsymbol{m}_I \cdot \boldsymbol{B} = -g_I \frac{\mu_\mathrm{K}}{\hbar} \boldsymbol{I} \cdot \boldsymbol{B} = -g_I \frac{\mu_\mathrm{K}}{\hbar} (\boldsymbol{F} \cdot \boldsymbol{J}) \cdot \boldsymbol{B} \tag{13}$$

nach (4) und (5.2.5./1) folgt weiter nach (5) und (5.2./14)

$$\Delta W_\mathrm{K} = -g_I \mu_\mathrm{K} (\boldsymbol{M}_F - \boldsymbol{M}_J) \cdot \boldsymbol{B}. \tag{14}$$

Für den Wellenlängenabstand in der Hyperfeinstrukturaufspaltung ergibt sich daraus ein Wert in der Größenordnung

$$\Delta\lambda = \frac{\lambda^2}{ch} \mu_\mathrm{K} B. \tag{15}$$

Das Verhältnis der Größenordnungen in den Linienaufspaltungen beim anomalen ZEEMAN-Effekt und durch Kernspin beträgt nach (15) und (5.2.5./11)

$$\frac{\Delta\lambda_{\mathrm{a.Z.-E.}}}{\Delta\lambda_\mathrm{K}} = \frac{\mu_\mathrm{B}}{\mu_\mathrm{K}} = \frac{m_\mathrm{p}}{m_\mathrm{e}} = \frac{1{,}67 \cdot 10^{-27}}{9{,}11 \cdot 10^{-31}} \approx 2 \cdot 10^3.$$

Da nach (5.2.5./11) $B = 200\ \mathrm{V\,s\,m^{-2}}$ eine Feinstrukturaufspaltung

$$\Delta\lambda_{\mathrm{a.Z.-E.}} = 1\ \mathrm{nm} = 10^{-9}\ \mathrm{m}$$

hervorruft, ergeben sich für die Hyperfeinstruktur Abstände

$$\Delta\lambda_\mathrm{K} = 0{,}5 \cdot 10^{-3} \cdot 10^{-9}\ \mathrm{m} = 0{,}5 \cdot 10^{-12}\ \mathrm{m}.$$

Sie erfordern zur Trennung das Auflösungsvermögen

$$\frac{\lambda}{\Delta\lambda} = \frac{500 \cdot 10^{-9}}{0{,}5 \cdot 10^{-12}} = 10^6.$$

## A Aufgaben

A 5.2.1. Wird das Elektron nach der klassischen Elektrostatik als rotierende Vollkugel betrachtet, deren Radius sich aus der Übereinstimmung von potentieller Energie und Ruhenergie ergibt, so kann aus dem Spin auf die Umlaufgeschwindigkeit eines Äquatorpunktes geschlossen werden. Berechnen Sie diese und leiten Sie daraus den Widerspruch dieser Betrachtungsweise ab.

A 5.2.2. Berechnen Sie die Abschirmkonstante $s_n$ für Zinn ($Z = 50$), wenn die Röntgenfrequenz der $L_\alpha$-Linie ($n = 3 \rightarrow n = 2$) $f = 8{,}29 \cdot 10^{17}$ Hz beträgt.

A 5.2.3. Das Röntgenspektrum eines unbekannten Elementes liefert für die $K_\alpha$-Linie die Wellenzahl $\frac{1}{\lambda} = 3 \cdot 10^{10}\ \mathrm{m}^{-1}$. Welche Ordnungszahl hat das unbekannte Element?

A 5.2.4. Geben Sie für Parahelium (entgegengerichtete Spins) den Gesamtspin und die Multiplizität der Spektrallinien an.

A 5.2.5. Wie groß ist die Multiplizität der Spektrallinien für Orthohelium bei einem schwachen äußeren Feld?

A 5.2.6. Stellen Sie für die beiden Außenelektronen des Ca-Atoms die Möglichkeiten der Spinanordnung, des Gesamtspins und der Multiplizität bei einem schwachen äußeren Feld auf.

A 5.2.7. Stellen Sie für das Sc-Atom (drei Außenelektronen) sämtliche Möglichkeiten der Spinanordnung auf.

A 5.2.8. Welche Möglichkeiten der Spinanordnung treten beim Chromatom (sechs Außenelektronen) im schwachen äußeren Feld auf?

A 5.2.9. Nach dem **Pauli-Prinzip** können in einem Quantensystem nicht zwei Elektronenzustände mit gleichen Quantenzahlen $n$, $l$, $m$, $s$ auftreten. Bestimmen Sie danach für ein System aus zwei Elektronen mit den Gesamtdrehimpulsen $L = 0$, 1, 2 sämtliche Werte des Gesamtspins $S$, des Gesamtdrehimpulses $J$, der magnetischen Quantenzahl $M_L$, der Spinquantenzahl $M_S$ sowie die Gesamtanzahl der möglichen Zustände. Wie sind die Terme zu bezeichnen?

A 5.2.10. Welches Auflösungsvermögen ist erforderlich, um das Wasserstoffdublett des Überganges $2^2\mathrm{p}_j \rightarrow 1\mathrm{s}_{1/2}$ $\left(j = \frac{1}{2}, \frac{3}{2}\right)$ zu trennen?

A 5.2.11. Für die beiden äußeren $\sigma$-Komponenten der $D_2$-Linie des Natriumatoms wird im Magnetfeld der Stärke $H = 10^6\ \mathrm{A\,m}^{-1}$ der Wellenzahlabstand $\Delta \frac{1}{\lambda} = 195{,}5\ \mathrm{m}^{-1}$ gemessen. Berechnen Sie daraus die spezifische Elektronenladung $\frac{e}{m}$.

A 5.2.12. Für die $H_\alpha$-Linie des Wasserstoffatoms ($\lambda = 656{,}3$ nm) wird bei 800 kA m$^{-1}$ das Zusammenschmelzen der $\pi$-Komponenten infolge des PASCHEN-BACK-Effektes gemessen. Schätzen Sie daraus die Wellenzahl- und die Wellenlängendifferenz in der Feinstruktur der Spektrallinien ab.

A 5.2.13. Bestimmen Sie die Aufspaltung der Energieniveaus infolge der Hyperfeinstruktur für den Übergang $3^2\mathrm{d}_{3/2} \rightarrow 2^2\mathrm{p}_{1/2}$ des Wasserstoffatoms.

A 5.2.14. Für starke Magnetfelder stellen sich der Kernspin $\boldsymbol{I}$ und der Gesamtdrehimpuls $\boldsymbol{J}$ unabhängig voneinander zum äußeren Feld richtungsgequantelt ein; es findet $\boldsymbol{I}$-$\boldsymbol{J}$-Entkopplung statt. Berechnen Sie für diesen Fall die magnetische Zusatzenergie und geben Sie die Anzahl der Einstellmöglichkeiten an.

# 6. Symmetrieoperationen und Normalschwingungen

## 6.1. Gruppentheorie der Symmetrieoperationen



### Einführung

*Schönflies-Symbole*

Ein symmetrischer Körper kann durch Drehungen, Spiegelungen oder eine Folge dieser Symmetrieoperationen mit sich selbst zur Deckung gebracht werden. Zur Bezeichnung der Symmetrieoperationen werden SCHÖNFLIES-Symbole verwendet:

**Drehungen** um den Symmetriewinkel $\frac{360^\circ}{n}$ werden durch $C_n$ bezeichnet. Die Drehachse heißt $C_n$-Achse, $n$ die **Zähligkeit. Hauptdrehachse** ist die Drehachse größter Zähligkeit.

**Beispiel 6.1.1. Zähligkeit und Hauptdrehachse**

Eine quadratische Platte (vgl. Bild 6.1.1) mit dem Grundflächenquadrat in der $x, y$-Ebene und dem Koordinatenanfangspunkt im Schwerpunkt hat zwei $C_2$-Achsen in Richtung der $x$- und der $y$-Achse sowie zwei $C_2$-Achsen in Richtung der Flächendiagonalen durch den Schwerpunkt. Hauptdrehachse ist die $C_4$-Achse in Richtung der $z$-Achse.

Die Hauptdrehachse wird als Bezugsrichtung gewählt und legt die **Vertikale** fest. Symmetrieoperationen durch **Spiegelung** werden durch das Symbol $\sigma$ gekennzeichnet. Dieses gibt gleichzeitig die Spiegelebene an. $\sigma_h$ kennzeichnet die Spiegelung an einer Ebene, die **horizontal** zur Hauptdrehachse liegt. Die Spiegelung an einer Ebene, die die Hauptdrehachse enthält, heißt **vertikale Spiegelung** und wird durch $\sigma_v$ oder $\sigma_d$ gekennzeichnet (vgl. 6.1.5.).

Die Operation, die **sämtliche Raumpunkte unverändert** läßt, erhält das Zeichen **1**. Symmetrieoperationen aus einer Drehung $C_n$ und einer Spiegelung an der Ebene senkrecht zur $C_n$-Achse werden als **Drehspiegelungen $n$-ter Ordnung** bezeichnet und durch

$$S_n = \sigma \cdot C_n = C_n \cdot \sigma$$

dargestellt. $C_n$ oder $\sigma$ brauchen dabei für sich allein keine Symmetrieoperationen zu sein, die Deckungsgleichheit ergeben. $C_n$ muß nicht Hauptdrehachse sein.

**Beispiel 6.1.2. Drehspiegelung $S_8$**

Zwei gegeneinander um 45° verdrehte Quadrate, von denen das eine im Abstand $a$ über, das zweite im Abstand $-a$ unter der Ebene $z = 0$ liegt, werden durch die Drehspiegelung

$$S_8 = C_8 \cdot \sigma_h = \sigma_h \cdot C_8$$

zur Deckung gebracht (vgl. Bild 6.1.2).

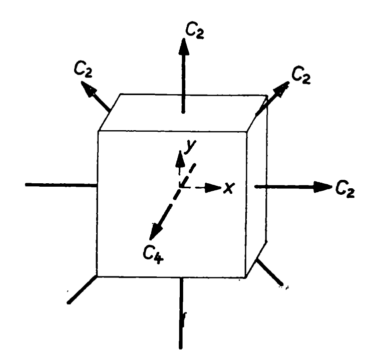



Bild 6.1.1. Drehachsen einer quadratischen Platte

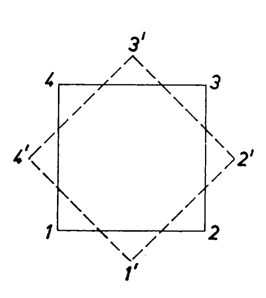



Bild 6.1.2. Drehspiegelung $S_8$

*Permutationen*

Bei Symmetrieoperationen werden bestimmte Punkte des symmetrischen Körpers miteinander vertauscht. Auf Grund dessen lassen sich die Gesetze der Symmetrieoperationen aus den Gesetzen über die Vertauschung bzw. Permutation verschiedener Elemente ableiten.
Die Umordnung von $n$ Objekten aus der Reihenfolge $1, 2, \ldots, n$ in die neue $a_1, a_2, \ldots, a_n$ heißt Permutation. Sie wird durch

$$\boldsymbol{a} = \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 & \ldots & n \\ a_1 & a_2 & a_3 & \ldots & a_n \end{pmatrix}$$

dargestellt.
Die Reihenfolge der Vertauschungen kann innerhalb einer Permutation beliebig geändert werden. Zum Beispiel wird $1 \to 3$, $2 \to 1$, $3 \to 2$ durch

$$\boldsymbol{a} = \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 3 & 1 & 2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 2 & 3 & 1 \\ 1 & 2 & 3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 3 & 2 & 1 \\ 2 & 1 & 3 \end{pmatrix} = \cdots$$

beschrieben.
Die **identische Operation**

$$\boldsymbol{e} = \boldsymbol{1} = \begin{pmatrix} 1 & 2 & \ldots & n \\ 1 & 2 & \ldots & n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a_1 & \ldots & a_n \\ a_1 & \ldots & a_n \end{pmatrix}$$

läßt alle Objekte auf ihrem Platz.

Bei der Verknüpfung zweier Permutationen $\boldsymbol{a}$ und $\boldsymbol{b}$ werden die vorgeschriebenen Permutationen nacheinander durchgeführt. Dabei ist **von rechts nach links** fortzuschreiten.

**Beispiel 6.1.3. Produkt zweier Permutationen**

Es sei

$$\boldsymbol{a} = \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 2 & 3 & 1 \end{pmatrix}, \qquad \boldsymbol{b} = \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 3 & 2 & 1 \end{pmatrix}.$$

Dann ist

$$\boldsymbol{a} \cdot \boldsymbol{b} = \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 2 & 3 & 1 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 3 & 2 & 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 3 & 2 & 1 \\ 1 & 3 & 2 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 3 & 2 & 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 1 & 3 & 2 \end{pmatrix}.$$

Dagegen folgt

$$\boldsymbol{b} \cdot \boldsymbol{a} = \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 3 & 2 & 1 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 2 & 3 & 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 2 & 3 & 1 \\ 2 & 1 & 3 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 2 & 3 & 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 2 & 1 & 3 \end{pmatrix}.$$

Das **kommutative Gesetz** ist für Permutationen im allgemeinen nicht erfüllt.

**Beispiel 6.1.4. Drehung und Spiegelung an einer quadratischen Platte**

Es seien 1, 2, 3, 4 die Eckpunkte eines Quadrates bzw. die Kanten der quadratischen Platte in Bild 6.1.1. Drehung von 90° um die Hauptdrehachse bedeutet

$$\boldsymbol{C}_4 = \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 & 4 \\ 2 & 3 & 4 & 1 \end{pmatrix}.$$

Drehung um 180° ergibt

$$\boldsymbol{C}_4{}^2 = \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 & 4 \\ 2 & 3 & 4 & 1 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 & 4 \\ 2 & 3 & 4 & 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 & 4 \\ 3 & 4 & 1 & 2 \end{pmatrix},$$

um 360°

$$\boldsymbol{C}_4{}^4 = \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 & 4 \\ 2 & 3 & 4 & 1 \end{pmatrix}^4 = \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 & 4 \\ 1 & 2 & 3 & 4 \end{pmatrix} = \mathbf{1}.$$

Die Spiegelung $\boldsymbol{\sigma}_{\mathrm{v}}$ an der durch die Kanten 1 und 3 gehenden Ebene wird durch

$$\boldsymbol{\sigma}_{\mathrm{v}} = \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 & 4 \\ 1 & 4 & 3 & 2 \end{pmatrix}$$

dargestellt mit

$$\boldsymbol{\sigma}_{\mathrm{v}}{}^2 = \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 & 4 \\ 1 & 4 & 3 & 2 \end{pmatrix}^2 = \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 & 4 \\ 1 & 2 & 3 & 4 \end{pmatrix}.$$

*Gruppen*

Die Gesamtheit aller Symmetrieoperationen eines Körpers bildet eine Gruppe. Sie ist mathematisch wie folgt definiert:
Eine Gruppe wird durch ihre Elemente $a, b, c, \ldots$ und die Art der Verknüpfung dieser Elemente definiert. Die Verknüpfung zweier Elemente $a$ und $b$ wird durch $a \cdot b$ gekennzeichnet, braucht jedoch nicht in der Multiplikation zu bestehen. Sie kann z. B. die Summation oder die Hintereinanderausführung von Operationen sein.

Die Menge $a$, $b$, $c$, ... bildet eine Gruppe $G$, wenn die folgenden vier Eigenschaften erfüllt werden:

1. Die Verknüpfung $a \cdot b$ zweier Elemente der Gruppe $G$ ergibt wieder ein Element der Gruppe $G$:

$$a \cdot b = c. \tag{1}$$

2. Die Verknüpfung dreier Elemente der Gruppe erfüllt das assoziative Gesetz:

$$(a \cdot b) \cdot c = a \cdot (b \cdot c). \tag{2}$$

3. Es existiert genau ein Einheitselement $e$, so daß für ein beliebiges Element $a$ der Gruppe

$$a \cdot e = e \cdot a = a \tag{3}$$

gilt. $e$ heißt auch neutrales oder identisches Element.

4. Zu jedem Element $a$ der Gruppe existiert genau ein inverses Element $a' = a^{-1}$ mit der Eigenschaft

$$a' \cdot a = e \qquad \text{bzw.} \qquad a^{-1} \cdot a = e. \tag{4}$$

Die Anzahl der Elemente, die eine Gruppe enthält, heißt **Ordnung** der Gruppe. Eine unendliche Gruppe enthält unendlich viele Elemente. Gruppen, in denen das kommutative Gesetz gilt, heißen kommutative oder ABELsche Gruppen.

**Beispiel 6.1.5. Gruppen**

Das Element $a = 1$ bildet eine Gruppe erster Ordnung, wenn die Verknüpfung die Multiplikation ist.
Das Element $a = 0$ bildet eine Gruppe erster Ordnung, wenn die Verknüpfung die Addition ist.
Die beiden Elemente

$$a = +1, \quad b = -1$$

bilden eine kommutative Gruppe zweiter Ordnung, wenn die Verknüpfung die Multiplikation ist.

*Permutationsgruppen*

Die Menge $P_n$ aller möglichen Vertauschungen von $n$ Elementen bildet eine Gruppe. (1) folgt durch die Definition. (2) läßt sich durch Nachrechnen beweisen. (3) ergibt sich aus der Definition. Das inverse Element zum Beweis von (4) entsteht durch Vertauschen der ersten und zweiten Zeile:

$$\boldsymbol{a} = \begin{pmatrix} a_1 & \dots & a_n \\ b_1 & \dots & b_n \end{pmatrix}, \qquad \boldsymbol{a}^{-1} = \begin{pmatrix} b_1 & \dots & b_n \\ a_1 & \dots & a_n \end{pmatrix}.$$

**Beispiel 6.1.6. Inverses Element**

$\begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 1 & 3 & 2 \end{pmatrix}$ und $\begin{pmatrix} 1 & 3 & 2 \\ 1 & 2 & 3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 1 & 3 & 2 \end{pmatrix}$ sind zueinander invers: $\begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 1 & 3 & 2 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} 1 & 3 & 2 \\ 1 & 2 & 3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 1 & 2 & 3 \end{pmatrix}$.

*Zyklen*

Permutationen lassen sich als Zyklen der Form

$$\boldsymbol{a} = \begin{pmatrix} a_1 & a_2 & \dots & a_n \\ a_2 & a_3 & \dots & a_1 \end{pmatrix} = (a_1 \quad a_2 \quad \dots \quad a_n)$$

darstellen. Objekte, die nicht permutiert werden, sind im Zyklus nicht enthalten. Für einen Zyklus $(p \ q \ r)$ gilt

$$(p \ q \ r) = (q \ r \ p) = (r \ p \ q).$$

Die Einheitspermutation wird als Zyklus (1) dargestellt.

**Beispiel 6.1.7. Permutationszyklen**

Es ist

$$\boldsymbol{a} = \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 & 4 & 5 \\ 3 & 1 & 4 & 2 & 5 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 3 & 4 & 2 & 5 \\ 3 & 4 & 2 & 1 & 5 \end{pmatrix} = (1 \ 3 \ 4 \ 2).$$

Die Drehung $C_4$ nach Bild 6.1.4 ist mit dem Zyklus (1 2 3 4), die Spiegelung $\sigma_v$ mit (2 4) identisch.

Ein Zyklus bricht ab, wenn er auf das erste Objekt zurückgeführt ist. Der verbleibende Rest von Permutationen kann durch weitere Zyklen dargestellt werden. Die nacheinander ablaufenden Zyklen bilden ein Produkt.

**Beispiel 6.1.8. Produkt von Permutationszyklen**

Es ist

$$\boldsymbol{a} = \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 & 4 & 5 \\ 3 & 5 & 4 & 1 & 2 \end{pmatrix} = (1 \ 3 \ 4) \cdot (2 \ 5) = (2 \ 5) \cdot (1 \ 3 \ 4).$$

Mathematisch läßt sich beweisen: Jeder Zyklus kann in Produkte aus Zyklen mit zwei Elementen zerlegt werden. Die Zahl dieser Produkte ist entweder gerade oder ungerade.

**Beispiel 6.1.9. Zerlegung in Zweierzyklen**

Es ist

$$(1 \ 2 \ 3 \ 4 \ 5) = (1 \ 2) \cdot (2 \ 3) \cdot (3 \ 4) \cdot (4 \ 5) \quad \text{stets geradzahlig,}$$

$$(1 \ 2 \ 3 \ 4 \ 5 \ 6) = (1 \ 2) \cdot (2 \ 3) \cdot (3 \ 4) \cdot (4 \ 5) \cdot (5 \ 6) \quad \text{stets ungeradzahlig}$$

(vgl. A 6.1.9.).

*Zyklische Gruppen und Erzeugende einer Gruppe*

Läßt sich eine Gruppe nur aus Potenzen eines Elementes $a$ darstellen, so heißt sie zyklisch. Sie wird durch

$$Z_m = [a]$$

gekennzeichnet. Ihre Elemente sind

$$a, a^2, \ldots, a^m = e.$$

$m$ wird als Ordnung der zyklischen Gruppe und des Elementes $a$ bezeichnet. Zyklische Gruppen sind kommutativ.

**Beispiel 6.1.10. Zyklische Gruppe des regelmäßigen Sechsecks**

Der Benzolring $C_6H_6$ besitzt als regelmäßiges Sechseck eine $\boldsymbol{C}_6$-Achse (vgl. Bild 6.1.3). Sämtliche Symmetrieoperationen der Drehung können als Potenzen des zyklischen Elementes

$$\boldsymbol{a} = (1\ 2\ 3\ 4\ 5\ 6) = \boldsymbol{C}_6$$

dargestellt werden mit

$$\boldsymbol{a}^2 = (1\ 3\ 5) \cdot (2\ 4\ 6), \qquad \boldsymbol{a}^3 = (1\ 4) \cdot (2\ 5) \cdot (3\ 6),$$

$$\boldsymbol{a}^4 = (1\ 5\ 3) \cdot (2\ 6\ 4), \qquad \boldsymbol{a}^5 = \boldsymbol{a}^{-1} = (1\ 6\ 5\ 4\ 3\ 2).$$

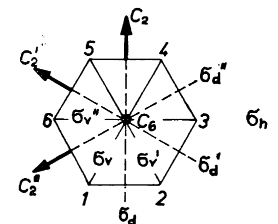



Bild 6.1.3. Drehachsen und Spiegelelemente am gleichmäßigen Sechseck. Die Sechseckebene ist $\sigma_h$-Ebene

Es bezeichne $M = \{a_1, \ldots, a_n\}$ eine Teilmenge der Gruppe $G$. Läßt sich jedes Element $a$ der Gruppe als Produkt endlich vieler Elemente aus $M$ oder von deren inversen Elementen

$$a = a_1{}^{\nu_1} \cdots a_n{}^{\nu_n} \qquad (\nu_1, \ldots, \nu_n \text{ ganzzahlig})$$

darstellen, so heißt $M$ Erzeugende der Gruppe $G$:

$$G = [M] = [a_1, \ldots, a_n].$$

**Beispiel 6.1.11. Erzeugende der Permutationsgruppe $\boldsymbol{P}_3$**

$P_3$ besteht aus (1), (1 2), (1 3), (2 3), (1 2 3), (1 3 2) und kann z. B. durch die Menge {(1 2), (1 3)} erzeugt werden:

$$(1) = (1\ 2)^2, \qquad (1\ 2\ 3) = (1\ 3) \cdot (1\ 2), \qquad (1\ 3\ 2) = (1\ 2) \cdot (1\ 3),$$

$$(2\ 3) = (1\ 2\ 3) \cdot (1\ 3).$$

*Untergruppen*

Eine Teilmenge $U$, die für sich allein eine Gruppe bildet und gleichzeitig einer größeren Gruppe $G$ angehört, heißt Untergruppe von $G$. Es läßt sich beweisen: Ist $U$ eine Teilmenge von $G$ und sind $a$ und $b$ zwei beliebige Elemente aus $U$, so ist $U$ genau dann Untergruppe, wenn mit $a$ und $b$ auch $a^{-1}$ und $a \cdot b$ zu $U$ gehören.

Die Menge aller Elemente $a_Z$ einer Gruppe $G$ mit der Eigenschaft

$$\boxed{a_Z \cdot a = a \cdot a_Z}$$

für ein beliebiges Element $a$ aus $G$ heißt **Zentrum** $Z$ der Gruppe $G$. Sie bildet eine kommutative Untergruppe. In kommutativen Gruppen umfaßt das Zentrum die gesamte Gruppe.

**Beispiel 6.1.12. Untergruppen**

Die Permutationsgruppe $P_2$ aller möglichen Permutationen zweier Elemente ist Untergruppe der Permutationsgruppe $P_3$, der Permutationen von drei Elementen, diese Untergruppe von $P_4$.

*Symmetriegruppen von Molekülen*

Die Atome eines Moleküls werden als Punkte idealisiert. Die Gesamtheit der an einer solchen Punktgruppe möglichen Symmetrieoperationen bildet eine Gruppe. Das System der räumlichen Symmetrieoperationen baut sich wie folgt auf:

1. Gruppen $C_n$ $(n = 1, 2, \ldots)$
Enthält ein Körper als Symmetrieelement nur eine **Drehachse** $\boldsymbol{C_n}$, so gehört er der Symmetriegruppe $C_n$ an. Sie sind zyklisch von der Ordnung $n$. $C_1$ kennzeichnet den unsymmetrischen Körper.

2. Gruppen $S_{2k}$ (einschl. $S_2 = C_i$)
Körper dieser Symmetriegruppe enthalten als Symmetrieelemente nur eine **Drehspiegelung** $S_{2k}$ geradzahliger Ordnung $n = 2k$. Sie sind zyklisch von der Ordnung $n$. Die Symmetriegruppe $S_{2k+1}$ $(k = 1, 2, \ldots)$ enthält neben $\boldsymbol{S_{2k+1}}$ auch $\boldsymbol{C_{2k+1}}$ und $\boldsymbol{\sigma}$ allein als Symmetrieelemente (vgl. 6.1.5.).

3. Gruppen $C_{nh} = [\boldsymbol{C_n}, \boldsymbol{\sigma_h}]$ (einschl. $S_{2k+1}$ und $C_s$)
Symmetrieelemente dieser Gruppen sind als Erzeugende eine **Drehung** $\boldsymbol{C_n}$ und die **Spiegelung** $\boldsymbol{\sigma_h}$. Die Ordnung ist $2n$ (vgl. A. 6.1.24.). Die Gruppen sind kommutativ. $C_{1h}$ enthält als Symmetrieelemente $\boldsymbol{1}$ und $\boldsymbol{\sigma_h}$, $C_{2h}$ zusätzlich die Inversion $\boldsymbol{i}$ und die Drehung $\boldsymbol{C_2}$. $C_{1h}$ wird auch mit $C_s$ bezeichnet.

4. Gruppen $C_{nv} = [\boldsymbol{C_n}, \boldsymbol{\sigma_v}]$
Erzeugende sind die **Drehung** $\boldsymbol{C_n}$ und die **Spiegelung** an einer dazu **vertikalen** Ebene $\boldsymbol{\sigma_v}$. Die Gruppen sind bis auf $C_{2v}$ nichtkommutativ. Ihre Ordnung ist $2n$ (vgl. A 6.1.25. und A 6.1.26.). Jede $\boldsymbol{C_n}$-Achse liegt zwischen zwei Spiegelebenen.

5. Gruppen $D_n = [\boldsymbol{C_n}, \boldsymbol{C_2}, \boldsymbol{C_2}', \ldots, \boldsymbol{C_2}^{(n-1)}]$
Symmetrieelemente sind $\boldsymbol{C_n}$ $(n \geqq 2)$ mit vertikaler und $\boldsymbol{C_2}^{(k)}$ mit **horizontaler Drehachse**. $\boldsymbol{C_n}$ ist stets eine Drehung zwischen verschiedenen horizontalen Drehachsen der Zähligkeit 2. Die Gruppen sind nichtkommutativ; ihre Ordnung beträgt $2n$ (vgl. A 6.1.27.).

6. Gruppen $D_{nh} = [\boldsymbol{C_n}, \boldsymbol{C_2}, \boldsymbol{C_2}', \ldots, \boldsymbol{C_2}^{(n-1)}, \boldsymbol{\sigma_h}]$
Gegenüber $D_n$ tritt als Erzeugende eine **Spiegelung** $\boldsymbol{\sigma_h}$ hinzu. Untergruppen zu $D_{nh}$ sind $D_n$, $C_{nh}$, $C_{nv}$. Die Ordnung ist $4n$ (vgl. A 6.1.29.).

7. Gruppen $D_{nd} = [C_n, C_2, C_2', \ldots, C_2^{(n-1)}, \sigma_d, \sigma_d', \ldots, \sigma_d^{(n-1)}]$
Den Erzeugenden der $D_n$-Gruppe wird die **Spiegelung an den Winkel zwischen zwei $C_2$-Achsen halbierenden Ebenen $\sigma_d^{(k)}$** hinzugefügt. Die Ordnung ist $4n$.

In den Charaktertafeln der Tab. 6.3.1 sind Angaben über die Symmetrieoperationen der einzelnen Symmetriegruppen gemeinsam mit anderen Daten zusammengestellt. Körper mit mehreren gleichberechtigten Hauptdrehachsen werden meist als selbständige Symmetriegruppen geführt. Dazu gehören das Tetraeder, der Würfel, das aus acht gleichseitigen Dreiecken aufgebaute Oktaeder und das Dodekaeder.
Ein Algorithmus zur Ableitung der Symmetriegruppe aus den vorliegenden Symmetrieelementen wird in 6.1.6. entwickelt.



## Probleme

### 6.1.1. Gruppe der Symmetrieoperationen des Tetraeders

Bei der Diamantstruktur des Kohlenstoffs oder des Siliziums befindet sich jedes der vierwertigen Atome im Zentrum eines Tetraeders und ist von vier gleich weit entfernten Nachbarn in den Tetraederecken umgeben (vgl. Bild 6.1.4). Das $CH_4$-Molekül hat ebenfalls Tetraederstruktur.

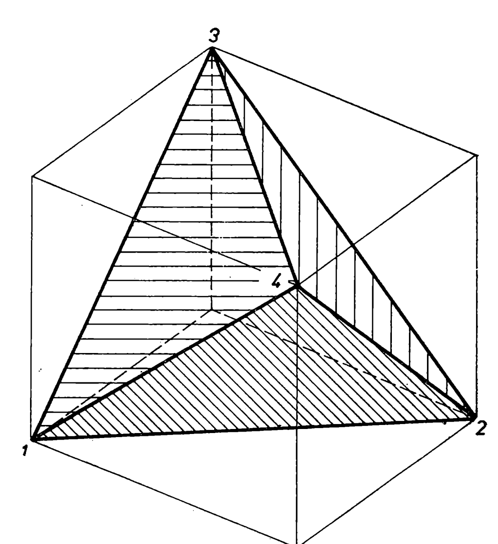



Bild 6.1.4. Tetraederstruktur

Die vier Eckpunkte des Tetraeders können mit 1, 2, 3, 4 numeriert werden. Achsen durch den Mittelpunkt und einen der vier Eckpunkte sind $C_3$-Achsen. Höhere Zähligkeit tritt nicht auf. Daher kann keine Hauptdrehachse definiert werden.
Stellen Sie die Gruppe der Symmetrieoperationen des Tetraeders auf. Untersuchen Sie die Wirkung einer Drehung von 180° um die durch die Mittelpunkte der Kanten 1 2 und 3 4 gehende Achse und einer sich daran anschließenden Drehung von 120° mit der durch 1 und den Mittelpunkt des Tetraeders gehenden Achse.

**Lösung:**

Die vollständige Permutationsgruppe $P_4$ umfaßt $n! = 4! = 24$ Elemente. Wählt man als $C_2$-Achse die Verbindung der Mittelpunkte durch die Kanten 1 2 und 3 4, so geht bei einer Drehung von 180° 1 in 2, 3 in 4 über:

$$C_2 = (1\ 2) \cdot (3\ 4) = (2\ 1) \cdot (4\ 3) \text{ usw.} \tag{1}$$

Analoge geometrische Bedeutung haben die Zyklen

$$C_2' = (1\ 3) \cdot (2\ 4), \tag{2}$$ $$C_2'' = (1\ 4) \cdot (2\ 3). \tag{3}$$

Drehungen von 90° um die durch die Mittelpunkte der Kanten 1 2 und 3 4 gehende Achse führen das Tetraeder nicht wieder in sich über. Erfolgt jedoch im Anschluß daran eine Spiegelung $\sigma$ an der durch den Tetraedermittelpunkt gehenden und senkrecht zur Drehachse stehenden Ebene, so ergibt sich für +90° Drehung der Zyklus

$$S_4 = (1\ 3\ 2\ 4), \tag{4}$$

für −90°

$$S_4^{-1} = (1\ 4\ 2\ 3). \tag{5}$$

Für die andern beiden Achsen erhält man die Zyklen

$$S_4' = (1\ 4\ 3\ 2) \tag{6}$$ bzw. $$S_4'^{-1} = (1\ 2\ 3\ 4) \tag{7}$$

und

$$S_4'' = (1\ 2\ 4\ 3) \tag{8}$$ bzw. $$S_4''^{-1} = (1\ 3\ 4\ 2). \tag{9}$$

Drehungen $C_3$ von 120° um die durch den Tetraedermittelpunkt und die Ecke 1 gehende Achse bewirken die Zyklen

$$C_3 = (2\ 3\ 4) \tag{10}$$ bzw. $$C_3^{-1} = (4\ 3\ 2), \tag{11}$$

$$C_3' = (1\ 4\ 3) \tag{12}$$ bzw. $$C_3'^{-1} = (3\ 4\ 1), \tag{13}$$

$$C_3'' = (1\ 2\ 4) \tag{14}$$ bzw. $$C_3''^{-1} = (4\ 2\ 1), \tag{15}$$

$$C_3''' = (1\ 3\ 2) \tag{16}$$ bzw. $$C_3'''^{-1} = (2\ 3\ 1). \tag{17}$$

Es verbleiben die Zyklen

$$\sigma_{12} = (1\ 2), \tag{18}$$ $$\sigma_{13} = (1\ 3), \tag{19}$$ $$\sigma_{14} = (1\ 4), \tag{20}$$

$$\sigma_{23} = (2\ 3), \tag{21}$$ $$\sigma_{24} = (2\ 4), \tag{22}$$ $$\sigma_{34} = (3\ 4). \tag{23}$$

Der Zyklus (1 2) entsteht durch Spiegelung an einer Ebene, die die Punkte 3, 4 sowie den Mittelpunkt auf der Kante 1 2 enthält. Analog ergeben sich die übrigen Zyklen.
Die Einheitspermutation

$$\mathbf{1} = (1) \tag{24}$$

läßt alles ungeändert.
Drehung von 180° um die durch die Mittelpunkte der Kanten 1 2 und 3 4 gehenden Achse und nachfolgende Drehung von 120° mit der Achse durch die Ecke 1 wird durch das Zyklenprodukt

$$C_3 \cdot C_2 = (2\ 3\ 4) \cdot (1\ 2) \cdot (3\ 4) = (3\ 2\ 1) = C_3'''$$

beschrieben, ist also nach (16) mit einer Drehung von +120° um die Ecke 4 identisch.

## 6.1.2. Gruppentafel der Symmetrieoperationen

Das $NH_3$-Molekül besteht aus drei H-Atomen in den Ecken eines gleichseitigen Dreiecks, über dessen Schwerpunkt sich das N-Atom befindet (vgl. Bild 6.1.5). Die H-Atome seien mit **1, 2, 3** numeriert. Ihre Permutation bringt das $NH_3$-Molekül mit sich selbst zur Deckung. Stellen Sie die vollständige Gruppe dieser Permutationen auf und interpretieren Sie jedes ihrer Elemente durch Symmetrieoperationen der Drehung und Spiegelung. Stellen Sie eine Tafel sämtlicher möglichen Produkte zweier Elemente auf (Gruppen- bzw. Multiplikationstafel).

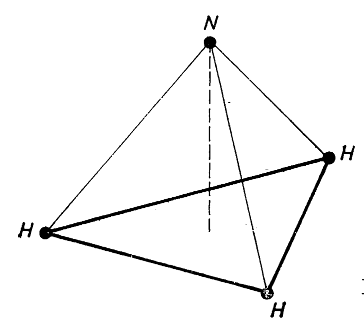



Bild 6.1.5. Struktur des $NH_3$-Moleküls

**Lösung:**

Die Anzahl der möglichen Vertauschungen von $n$ Objekten beträgt $n!$, im vorliegenden Fall $3! = 6$. In der vollständigen Permutationsgruppe $P_3$ sind daher sechs Elemente enthalten. Unter diesen befindet sich die identische Permutation

$$\mathbf{1} = (1). \tag{1}$$

Der Zyklus

$$(1\ 2\ 3) \tag{2}$$

bedeutet Drehung $C_3$ von 120° um die auf der Dreiecksfläche im Schwerpunkt errichtete Senkrechte als Drehachse.
Die Wiederholung dieser Drehung ergibt

$$C_3{}^2 = (1\ 2\ 3) \cdot (1\ 2\ 3) = (1\ 3\ 2), \tag{3}$$

nochmalige Drehung von 120° die Identität.
Der Zyklus

$$(2\ 3) \tag{4}$$

charakterisiert die Spiegelung $\sigma_v$ an der durch den Punkt 1 und die Hauptdrehachse gehenden Ebene. Die Zyklen

$$(1\ 3) \tag{5}$$

und

$$(1\ 2) \tag{6}$$

stellen Spiegelungen $\sigma_v'$ und $\sigma_v''$ mit der Spiegelebene durch den Punkt 2 bzw. 3 und durch die $C_3$-Achse dar.
Zur Aufstellung der Multiplikations- bzw. Gruppentafel werden alle Elemente der Gruppe in einer Zeile und nochmals in einer Spalte links unter der Zeile angeordnet. In der $i$-ten Zeile und $k$-ten Spalte steht das Produkt des $i$-ten Elements mit dem $k$-ten Element (vgl. Tab. 6.1.1).

### 6.1.3. Isomorphie

Zwei Gruppen $G_1$ und $G_2$ heißen isomorph, wenn es möglich ist, den Elementen der Gruppe $G_1$ umkehrbar eindeutig die Elemente der Gruppe $G_2$ so zuzuordnen, daß der Verknüpfung zweier Elemente in $G_1$ die Verknüpfung der zugeordneten Elemente in $G_2$ entspricht. Das Molekül $CH_3D$ setzt sich aus dem Kohlenstoffatom im Zentrum eines Tetraeders, den drei Wasserstoffatomen in den Ecken 1, 2, 3 und dem Deuteriumatom in der Ecke 4 zusammen. Die Drehsymmetriegruppe des regelmäßigen Sechsecks ist in Beispiel 6.1.6. dargestellt. Stellen Sie für beide die Gruppentafeln der Symmetrieoperationen auf und untersuchen Sie, ob die beiden Gruppen isomorph sind.

**Lösung:**

In der Aufstellung für das Tetraeder nach 6.1.1. sind alle Elemente zu streichen, die das Objekt 4 enthalten. Es verbleiben die Operationen

$$\begin{matrix} \boldsymbol{C}_3 & \boldsymbol{C}_3^{\,2} & \boldsymbol{\sigma}_{\rm v} & \boldsymbol{\sigma}_{\rm v}' & \boldsymbol{\sigma}_{\rm v}'' & \mathbf{1} \\ (1\;2\;3) & (1\;3\;2) & (2\;3) & (1\;3) & (1\;2) & (1). \end{matrix} \tag{1}$$

Für die zyklische Gruppe des regelmäßigen Sechsecks erhält man

$$\boldsymbol{C}_6 \quad \boldsymbol{C}_6^{\,2} \quad \boldsymbol{C}_6^{\,3} \quad \boldsymbol{C}_6^{\,4} \quad \boldsymbol{C}_6^{\,5} \quad \mathbf{1}. \tag{2}$$

Wie die Elemente der ersten Gruppe (1) zeigen, entsprechen die Symmetrieoperationen des $CH_3D$-Moleküls vollständig denen des $NH_3$-Moleküls. Daher sind auch die Gruppentafeln identisch und diese beiden Gruppen isomorph. Sie sind nichtkommutativ.
Dagegen ergibt sich für die zyklische Gruppe des regelmäßigen Sechsecks die Gruppentafel nach Tab. 6.1.2. Sie ist, wie jede zyklische Gruppe, kommutativ. Da es durch keine Umordnung der Elemente möglich ist, eine nichtkommutative Gruppe in eine kommutative Gruppe umzuwandeln, sind die Gruppe der Symmetrieoperationen des $CH_3D$-Moleküls und die Gruppe der zyklischen Operationen des regelmäßigen Sechsecks nicht isomorph.

### 6.1.4. Inversion *i*

Auf einer Kugel mit dem Radius $r = r_0$ seien unter dem Höhenwinkel $\vartheta = 60°$ gleiche Massen in den Punkten 1, 2, 3 mit den Azimutkoordinaten $\varphi = 0$, $\varphi = 120°$, $\varphi = 240°$ angeordnet. Dieselben Massen befinden sich in den Punkten 1′, 2′, 3′ auf der Kugel unter dem Höhenwinkel $\vartheta = -60°$ mit den Azimutkoordinaten $\varphi = 180°$, $\varphi = 300°$, $\varphi = 60°$. Wie man aus Bild 6.1.6 entnimmt, ergeben sich die Punkte 1′, 2′, 3′ aus 1, 2, 3, wenn diese am Kugelmittelpunkt bzw. Koordinatenanfangspunkt derart gespiegelt werden, daß der Punkt mit den Kugelkoordinaten $r, \vartheta, \varphi$ in den Punkt mit den Kugelkoordinaten $r, -\vartheta, \varphi \pm \pi$ übergeführt wird. Diese Symmetrieoperation heißt **Punktspiegelung** oder Inversion $\boldsymbol{i}$. Der Spiegelungspunkt ist das **Inversionszentrum**. Allgemein wird bei der Punktspiegelung der vom Inversionszentrum $\boldsymbol{r}_0$ zu einem betrachteten Punkt $\boldsymbol{r}$ gezogene Radiusvektor $\boldsymbol{r} - \boldsymbol{r}_0$ umgekehrt.
Stellen Sie die Inversion durch eine Folge von Drehungen und Spiegelungen dar und untersuchen Sie, ob diese Operationen miteinander vertauscht werden können. Bestimmen Sie die inverse Operation der Punktspiegelung.

**Lösung:**

Die Richtung $\vartheta = \pm 90°$, d. h. die Gerade zwischen den beiden Polen der Kugel, stellt die Hauptdrehachse $\boldsymbol{C}_3$ dar. Eine Drehung $\boldsymbol{C}_2$ um die $\boldsymbol{C}_3$-Achse, d. h. von 180°, transformiert $\varphi$ in $\varphi \pm \pi$, bringt jedoch den Körper nicht mit sich zur Deckung.

Auch eine Spiegelung $\sigma_h$ an der durch den Koordinatenanfangspunkt gehenden, horizontal zur Hauptdrehachse liegenden Ebene allein, bei der $\vartheta$ in $-\vartheta$ transformiert wird, ergibt keine Deckungsgleichheit. Werden diese Operationen jedoch nacheinander ausgeführt

$$\boxed{i = \sigma_h \cdot C_2}, \tag{1}$$

so kommt der Körper mit sich zur Deckung.
Die Spiegelung $\sigma_h$ hat nur Einfluß auf die Höhenkoordinate $\vartheta$, unabhängig von der Azimutkoordinate $\varphi$. Jede Drehung $C_n$ um die Achse senkrecht zur Spiegelebene $\sigma_h$ nimmt nur Einfluß auf die Azimutkoordinaten, unabhängig von den Höhenkoordinaten. Daher können

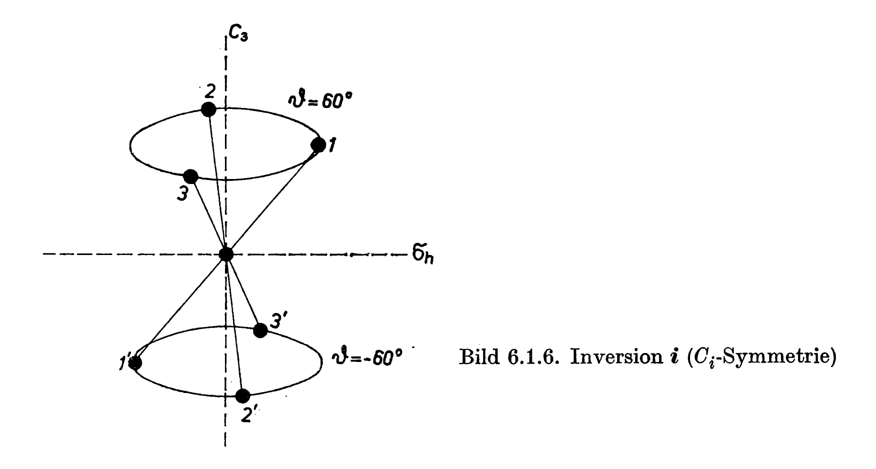



Bild 6.1.6. Inversion $i$ ($C_i$-Symmetrie)

Drehungen $C_n$ und Spiegelungen $\sigma$ an der Ebene horizontal zu $C_n$ in der Reihenfolge vertauscht werden:

$$C_n \cdot \sigma = \sigma \cdot C_n. \tag{2}$$

Speziell für die Inversion gilt

$$C_2 \cdot \sigma = \sigma \cdot C_2. \tag{3}$$

Ferner folgt aus (1)

$$i^{-1} = (\sigma \cdot C_2)^{-1} = C_2^{-1} \cdot \sigma^{-1} = C_2 \cdot \sigma = i. \tag{4}$$

## 6.1.5. Drehspiegelungen $S_n$

Symmetrieoperationen aus einer Drehung $C_n$ und einer nachfolgenden Spiegelung $\sigma$ an der Ebene senkrecht zur $C_n$-Achse heißen Drehspiegelungen $n$-ter Ordnung. Nach (6.1.4./2) gilt das kommutative Gesetz, so daß $C_n$ und $\sigma$ vertauscht werden können.
Bestimmen Sie die Potenzen von Drehspiegelungen ungeradzahliger und geradzahliger Ordnung. Untersuchen Sie, ob das Tetraeder durch eine Drehspiegelung mit sich zur Deckung gebracht werden kann, und bestimmen Sie die Potenzen.

**Lösung:**

Für **ungeradzahlige Ordnung** der Drehspiegelung $n = 2k - 1$ folgt wegen $C_{2n}^2 = C_n$ nebst $\sigma^2 = 1$

$$S_{2k-1}^2 = (C_{2k-1} \cdot \sigma)^2 = C_{2k-1}^2 \cdot \sigma^2 = C_{2k-1}^2, \tag{1}$$

$$S_{2k-1}^3 = C_{2k-1}^2 \cdot C_{2k-1}\sigma = C_{2k-1}^3\sigma, \tag{2}$$

...

Die $n$-te Potenz wird gleich

$$S_n{}^n = S_{2k-1}^{2k-1} = (C_{2k-1} \cdot \sigma)^{2k-1} = C_{2k-1}^{2k-1} \cdot \sigma = C_n{}^n \cdot \sigma = \sigma. \tag{3}$$

Sie ist also nicht identisch mit der Einheitspermutation. Gleichzeitig sieht man daraus, daß bei ungeradzahliger Ordnung der Drehspiegelung die Spiegelung allein eine Symmetrieoperation der Gruppe darstellt.
Ferner erhält man für $n = 2k - 1$

$$S_n{}^{n+1} = S_n{}^n \cdot S_n = \sigma \cdot C_n \cdot \sigma = C_n. \tag{4}$$

Auch die Drehung allein stellt ein Symmetrieelement dar. Die einzelnen Elemente der Gruppe können daher gemäß

$$S_{2k-1} = [C_n, \sigma] \tag{5}$$

aus den Erzeugenden $C_n$ und $\sigma$ aufgebaut werden.
Weiter ergibt sich

$$S_n{}^{2n} = (C_{2k-1}\sigma)^{2n} = 1. \tag{6}$$

Insgesamt treten somit $2n$ verschiedene Potenzen auf, d. h., Drehspiegelungen ungeradzahliger Ordnung $n$ stellen Elemente der Ordnung $2n$ dar. Dagegen folgt für Drehspiegelungen **geradzahliger Ordnung $n = 2k$**

$$S_n = S_{2k} = C_n\sigma, \tag{7}$$

$$S_n{}^2 = C_n{}^2\sigma^2 = C_k = C_{n/2}, \tag{8}$$

$$S_n{}^3 = C_kC_{2k}\sigma = C_{3/2}^3\sigma, \tag{9}$$

...

$$S_n{}^n = 1. \tag{10}$$

Drehspiegelungen geradzahliger Ordnung $n$ sind daher Elemente der Ordnung $n$. Die Ordnung der Elemente von Drehspiegelungen ist somit stets geradzahlig.
Nach (6.1.1./4), (6.1.1./6) und (6.1.1./8) enthält die Gruppe der Symmetrieoperationen des Tetraeders die Drehspiegelungen vierter Ordnung

$$S_4 = (1\ 3\ 2\ 4),\quad S_4' = (1\ 4\ 3\ 2),\quad S_4'' = (1\ 2\ 4\ 3).$$

Für $S_4$ erhält man die Potenzen

$$S_4 = (1\ 3\ 2\ 4),\quad S_4{}^2 = (2\ 1) \cdot (3\ 4),\quad S_4{}^3 = (1\ 4\ 2\ 3),\quad S_4{}^4 = (1).$$

## 6.1.6. Bestimmung der Symmetriegruppe

Stellen Sie einen Algorithmus zur Bestimmung der Symmetriegruppe eines geometrischen Körpers auf. Bestimmen Sie danach die Symmetriegruppen des $C_6H_6$-, des $C_2H_6$- und des $JF_5$-Moleküls. Stellen Sie die Symmetrieoperationen dieser Körper zusammen.

Untersuchen Sie ferner die Symmetrie des linearen $CO_2$-Moleküls, und zwar für Sauerstoffatome gleicher und verschiedener Isotope. Benzol $C_6H_6$ hat die Struktur eines regelmäßigen Sechsecks nach Bild 6.1.7 mit einem C-Atom und einem H-Atom an jeder Ecke. Äthan $C_2H_6$ enthält in der vertikalen Achse zwei C-Atome. Je drei H-Atome liegen zusammen mit einem C-Atom in einer Ebene senkrecht zur vertikalen Achse, und zwar so, daß beide Gruppen um $\frac{\pi}{3}$ gegeneinander verdreht sind (vgl. Bild 6.1.8).
Jodfluorid $JF_5$ bildet eine Pyramide mit quadratischer Grundfläche nach Bild 6.1.9. An jeder Ecke befindet sich ein F-Atom, im Mittelpunkt der Grundfläche das J-Atom.

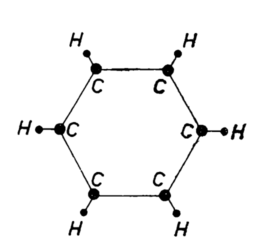



Bild 6.1.7. Struktur des $C_6H_6$-Moleküls

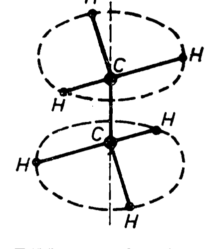



Bild 6.1.8. Struktur des $C_2H_6$-Moleküls

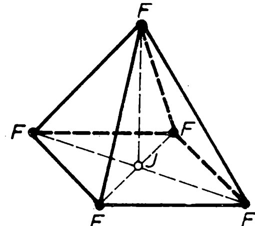



Bild 6.1.9. Struktur des $JF_5$-Moleküls

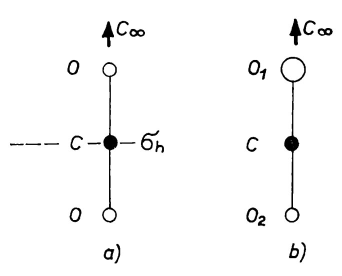



Bild 6.1.10. Struktur linearer Moleküle.
a) $D_{\infty h}$-Struktur, b) $C_{\infty v}$-Struktur

**Lösung:**

Wir legen zunächst die **Hauptdrehachse $C_n$** fest und untersuchen, ob die Zähligkeiten größer oder zumindest gleich zwei sind.
Für $n = 1$, wenn keine Drehsymmetrie vorhanden ist, kann der Körper **Spiegelsymmetrie**, d. h. eine Spiegelebene $\sigma$, aufweisen. In diesem Fall gehört er der Gruppe $C_s$ an.
Wenn auch keine Spiegelungselemente vorhanden sind, kann **Drehspiegelung** $S_{2k}$ möglich sein, so daß der Körper einer Gruppe $S_{2k}$ angehört.
Ist auch das nicht der Fall, so liegt ein **unsymmetrischer Körper** der Gruppe $C_1$ vor.
Bei vorhandener Drehsymmetrie wird geprüft, ob der Körper einer **speziellen Gruppe höherer Symmetrie** angehört. Dazu müssen mehrere Hauptdrehachsen mit einer Zähligkeit $n \geqq 3$ vorliegen.
Danach ist zu untersuchen, ob eine Drehachse mit der **Zähligkeit** $\infty$ wie beim linearen Molekül vorliegt. Ist in diesem Falle eine horizontale Spiegelungsebene wie beim linearen $CO_2$-Molekül vorhanden, so liegt $D_{\infty h}$-Symmetrie vor; im anderen Falle, z. B. bei verschiedenen Sauerstoffisotopen, $C_{\infty v}$-Symmetrie (vgl. Bild 6.1.10).
Bei endlicher Zähligkeit $n \geqq 2$ wird weiter untersucht, ob **$C_2$-Achsen senkrecht zur Hauptdrehachse** vorliegen. Wenn das der Fall ist, gehört der Körper einer **$D$-Gruppe** an, sonst einer

**$C$-Gruppe.** In beiden Fällen wird weiter untersucht, ob eine **horizontale Spiegelungsebene** vorliegt. Wird diese Frage positiv entschieden, gehört der Körper der Gruppe $D_{nh}$ bzw. $C_{nh}$ an.
Liegen keine $C_2$-Achsen horizontal zur $C_n$-Achse und keine Spiegelungsebenen $\sigma_h$ vor, so können **vertikale Spiegelungsebenen** $\sigma_v$ auftreten. Ist das der Fall, liegt die Gruppe $C_{nv}$ vor, sonst $C_n$.

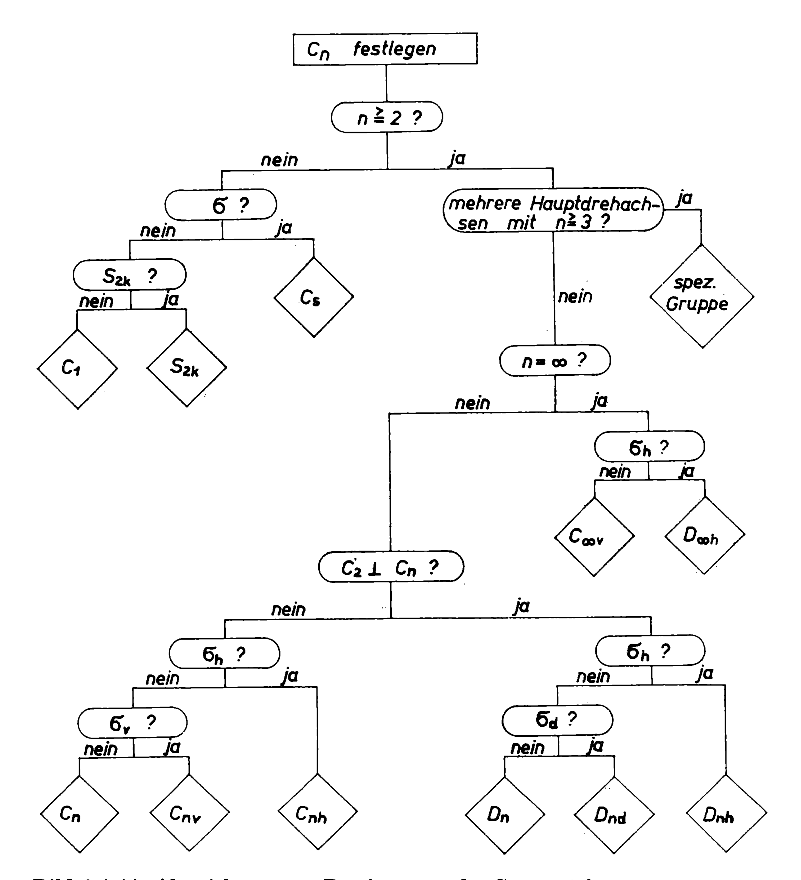



Bild 6.1.11. Algorithmus zur Bestimmung der Symmetriegruppe

Bei vorhandenen $C_2$-Achsen senkrecht zur $C_n$-Achse, jedoch fehlendem $\sigma_h$, ist zu untersuchen, ob eine vertikale Spiegelebene $\sigma_d$ vorhanden ist, die den Winkel zwischen zwei $C_2$-Achsen halbiert. Wenn das der Fall ist, gehört der Körper der Gruppe $D_{nd}$ an, sonst zur Gruppe $D_n$.
Bild 6.1.11 zeigt den Algorithmus grafisch.
In den Beispielen nach den Bildern 6.1.8, 6.1.9 und 6.1.10 ist $n \geqq 2$. Es liegt keine spezielle Symmetriegruppe und keine Drehachse unendlich hoher Zähligkeit vor.
Der **Benzolring** weist eine $C_6$-Achse als Hauptdrehachse auf. Drei $C_2$-Achsen gehen durch je zwei Mitten der Sechseckseiten, drei weitere durch je zwei Ecken. Es liegen sechs vertikale Spiegelungsebenen $\sigma_v$ bzw. $\sigma_d$ vor, die durch die Hauptdrehachse sowie zwei gegenüberliegende Ecken bzw. Seitenmitten gehen. Außerdem ist horizontale Spiegelung $\sigma_h$ an der Ebene des

Benzolrings möglich. Die $\boldsymbol{C}_6$-Achse ist somit gleichzeitig $\boldsymbol{S}_6$-Achse. Ferner sind $\boldsymbol{S}_3$- und $\boldsymbol{i}$-Symmetrie vorhanden.
Benzol mit $n = 6$ gehört wegen $\boldsymbol{C}_2$-Achsen zu einer $D$-Gruppe, und zwar wegen der $\sigma_\mathrm{h}$-Ebene zur $D_{6\mathrm{h}}$-Gruppe.
Das Äthanolmolekül besitzt eine $\boldsymbol{C}_3$-Achse als Hauptdrehachse. Ferner sind drei $\boldsymbol{C}_2$-Drehungen mit Achsen senkrecht zur $\boldsymbol{C}_3$-Achse möglich. Sie gehen durch den Mittelpunkt zwischen den beiden C-Atomen auf der Hauptdrehachse und liegen parallel zur Winkelhalbierenden zwischen einem H-Atom und der Projektion eines der H-Atome aus der anderen Ebene. Mit den Bezeichnungen nach Bild 6.1.9 bewirken sie

$$\boldsymbol{C}_2 = (1\ 4) \cdot (2\ 6) \cdot (3\ 5), \quad \boldsymbol{C}_2' = (1\ 5) \cdot (2\ 4) \cdot (3\ 6),$$
$$\boldsymbol{C}_2'' = (1\ 6) \cdot (2\ 5) \cdot (3\ 4).$$

Horizontale Spiegelung ist nicht möglich, dagegen Drehspiegelung $\boldsymbol{S}_6$. Ferner sind drei vertikale Spiegelungen $\sigma_\mathrm{d}$ möglich, deren Spiegelebenen die Winkel zwischen den $\boldsymbol{C}_2$-Achsen halbieren. Das Äthanmolekül mit $n = 3$ gehört wegen der $\boldsymbol{C}_2$-Achsen einer $D$-Gruppe an, da keine $\sigma_\mathrm{h}$-, jedoch $\sigma_\mathrm{d}$-Ebenen vorhanden sind, zur $D_{3\mathrm{d}}$-Gruppe.
Das **Molekül $\mathbf{JF_5}$** weist eine $\boldsymbol{C}_4$-Achse als Hauptdrehachse auf. Es sind jedoch keine $\boldsymbol{C}_2$-Drehungen senkrecht dazu möglich, so daß nur eine $C$-Gruppe in Frage kommt. Horizontale Spiegelung ist nicht vorhanden, jedoch liegen vier $\sigma_\mathrm{v}$-Spiegelungen vor. Die Ebenen dieser Spiegelungen gehen durch die $\boldsymbol{C}_4$-Achse und zwei gegenüberliegende Ecken oder Seitenmitten. Das Molekül weist somit $\boldsymbol{C}_{4\mathrm{v}}$-Symmetrie auf.



## Aufgaben

A 6.1.1. Überprüfen Sie bezüglich der Multiplikation und der Addition als Verknüpfungsoperationen, ob die aus dem Element 0 bestehende Menge eine Gruppe bildet.

A 6.1.2. Vorgegeben sei das Produkt $c = b^2xa$ einer Gruppe. Berechnen Sie aus $c$ das Element $x$.

A 6.1.3. Berechnen Sie zur vorangegangenen Aufgabe $c^{-2} \cdot (ab^{-1})^2 \cdot c \cdot b \cdot a^{-1}$ für eine ABELsche Gruppe. Wie lautet das Ergebnis, wenn nur $a \cdot b = b \cdot a$ gilt?

A 6.1.4. Es sei $\boldsymbol{a} = \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 2 & 3 & 1 \end{pmatrix}, \quad \boldsymbol{b} = \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 2 & 1 & 3 \end{pmatrix}.$
Berechnen Sie $\boldsymbol{a} \cdot \boldsymbol{b}$ und $\boldsymbol{b} \cdot \boldsymbol{a}$.

A 6.1.5. Untersuchen Sie, ob die Gruppe $P_2$ aller Permutationen von zwei Objekten kommutativ ist.

A 6.1.6. Schreiben Sie die Permutation

$$\begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 & 4 & 5 & 6 & 7 & 8 & 9 & 10 & 11 & 12 \\ 5 & 2 & 4 & 6 & 1 & 12 & 7 & 8 & 11 & 9 & 10 & 3 \end{pmatrix}$$

in Zyklen.

A 6.1.7. Stellen Sie das Zyklenprodukt $(1\ 3\ 4) \cdot (1\ 2) \cdot (2\ 3)$ als Permutation dar.

A 6.1.8. Bestimmen Sie die Gruppe der Symmetrieoperationen des gleichschenkligen Dreiecks mit den den gleichen Winkeln gegenüberliegenden Ecken 1 und 2.

A 6.1.9. Stellen Sie die Zyklen $(1\ 2\ 3\ 4)$ und $(1\ 2\ 3\ 4\ 5)$ als Produkte von Zweierzyklen dar und untersuchen Sie, ob sich die Anzahl der Faktoren um eins vermehren oder vermindern läßt.

A 6.1.10. Welche Wirkung hat auf ein Tetraeder eine Drehung von 120° um die durch die Ecke 1 und den Tetraedermittelpunkt gehende Achse, eine nachfolgende Spiegelung an der durch die Eckpunkte 1, 2 und den Mittelpunkt der Kanten 3 4

gehenden Ebene und eine Drehung von 90° um die durch die Mittelpunkte der Kanten 1 2 und 3 4 gehenden Achse mit nachfolgender Spiegelung an der senkrecht zu dieser Achse stehenden und durch den Tetraedermittelpunkt gehenden Ebene?

A 6.1.11. Die Vierergruppe $V_4$ wird von den Zyklen (1), (1 2) · (3 4), (1 3) · (2 4), (1 4) · (2 3) gebildet. Stellen Sie die Multiplikationstafel dieser Gruppe auf.

A 6.1.12. Beweisen Sie, daß das Zentrum $Z$ einer Gruppe $G$ eine kommutative Untergruppe bildet.

A 6.1.13. Bestimmen Sie das Zentrum der Permutationsgruppe $P_3$.

A 6.1.14. Bestimmen Sie das Zentrum der Gruppe der zyklischen Operationen des regelmäßigen Sechsecks.

A 6.1.15. Berechnen Sie das inverse Element zu $\sigma \cdot \tau$, d. h., lösen Sie $(\sigma \cdot \tau)^{-1}$ auf.

A 6.1.16. Zwei Spiegelungen an zueinander senkrechten Ebenen sind kommutativ. Leiten Sie daraus mit den Mitteln der Gruppentheorie ab, daß eine Drehung um die Hauptdrehachse $\boldsymbol{C}(\varphi)$ und eine Spiegelung $\boldsymbol{\sigma}_{\mathrm{h}}$ kommutativ sind.

A 6.1.17. Unter welchen Bedingungen führt die Aufeinanderfolge je zweier Spiegelungen $\boldsymbol{\sigma}_1 \cdot \boldsymbol{\sigma}_2$ und $\boldsymbol{\sigma}_1' \cdot \boldsymbol{\sigma}_2'$ zu dem gleichen Ergebnis?

A 6.1.18. Stellen Sie eine Spiegelung $\boldsymbol{\sigma}$ als Produkt einer Drehung und einer vorgegebenen Spiegelung $\boldsymbol{\sigma}_0$ dar.

A 6.1.19. Untersuchen Sie, ob die Inversion $\boldsymbol{i}$ mit einer beliebigen Drehung $\boldsymbol{C}_n$ vertauscht werden kann.

A 6.1.20. Untersuchen Sie, ob die Inversion $\boldsymbol{i}$ mit einer beliebigen Spiegelung $\boldsymbol{\sigma}$ vertauscht werden kann.

A 6.1.21. $\boldsymbol{C}_2$ sei Hauptdrehachse. Berechnen Sie $\boldsymbol{C}_2\boldsymbol{i}$ und $\boldsymbol{i}\boldsymbol{C}_2$.

A 6.1.22. Berechnen Sie das Ergebnis einer Spiegelung $\boldsymbol{\sigma}_{\mathrm{h}}$ an der durch den Inversionspunkt gehenden Ebene in Verbindung mit einer Inversion.

A 6.1.23. Untersuchen Sie, ob das $CH_4$-Molekül durch Inversion mit sich zur Deckung gebracht werden kann.

A 6.1.24. Bestimmen Sie die Symmetrieelemente der Gruppe $C_{3\mathrm{h}}$, und untersuchen Sie, ob diese kommutativ ist.

A 6.1.25. Bestimmen Sie die Elemente der Symmetrieoperationen an einer Pyramide, deren Grundfläche ein gleichseitiges Dreieck ist.

A 6.1.26. Bestimmen Sie die Elemente der Symmetrieoperationen an einem Zylinder, dessen Grundfläche ein regelmäßiges Sechseck ist. Dabei treten außer den Spiegelflächen $\boldsymbol{\sigma}_{\mathrm{v}}$, $\boldsymbol{\sigma}_{\mathrm{v}}'$, $\boldsymbol{\sigma}_{\mathrm{v}}''$ durch die Kanten drei weitere Spiegelflächen $\boldsymbol{\sigma}_{\mathrm{d}}$, $\boldsymbol{\sigma}_{\mathrm{d}}'$, $\boldsymbol{\sigma}_{\mathrm{d}}''$ durch die Drehachse auf, die jeweils eine Seite des regelmäßigen Sechsecks bzw. den Winkel zwischen zwei Spiegelebenen $\boldsymbol{\sigma}_{\mathrm{v}}$ halbieren.

A 6.1.27. Bestimmen Sie die Symmetrieelemente der Gruppe $D_5$.

A 6.1.28. Welcher Symmetriegruppe gehört ein Rechteck an? Geben Sie die Gruppe der Symmetrieoperationen an.

A 6.1.29. Bestimmen Sie die Elemente der Gruppe $D_{n\mathrm{h}} = [\boldsymbol{C}_{\mathrm{n}}, \boldsymbol{C}_2, \boldsymbol{\sigma}_{\mathrm{h}}]$.

A 6.1.30. Bestimmen Sie die Elemente der Gruppe $D_{n\mathrm{d}} = [\boldsymbol{C}_{\mathrm{n}}, \boldsymbol{C}_2, \boldsymbol{\sigma}_{\mathrm{d}}]$, und reduzieren Sie die Anzahl der Erzeugenden.

A 6.1.31. Bestimmen Sie die Symmetriegruppe von HD.

A 6.1.32. Bestimmen Sie die Symmetriegruppe von $H_2$.

A 6.1.33. $O_3$ enthält drei O-Atome in den Ecken eines gleichschenkligen Dreiecks. Bestimmen Sie die Symmetrieelemente und die Symmetriegruppe.

A 6.1.34. $PCl_5$ enthält das P-Atom in der Mitte eines gleichseitigen Dreiecks, in dessen Ecken sich je ein Cl-Atom befindet. Ein weiteres liegt genau darüber, ein anderes genau unter dem P-Atom. Welcher Symmetriegruppe gehört $PCl_5$ an?

A 6.1.35. $SF_5Cl$ hat vier F-Atome in den Ecken eines Quadrats, eins genau über dem Mittelpunkt. Das S-Atom befindet sich im Mittelpunkt des Quadrats, das Cl-Atom genau darunter. Bestimmen Sie die Symmetriegruppe.

A 6.1.36. $C_3H_4$ enthält die drei C-Atome in der vertikalen Achse. Ihre Koordinaten seien $(0, 0, 0)$, $(0, 0, -z_0)$, $(0, 0, z_0)$. Die H-Atome liegen in den Ecken eines Quadrats, wobei die Lage der oberen beiden gegen die der unteren um $\frac{\pi}{2}$ verdreht ist, so daß sich die Koordinaten $(a, -a, -b)$, $(-a, a, -b)$, $(a, a, b)$, $(-a, -a, b)$ ergeben. Bestimmen Sie die Symmetrieelemente und die Symmetriegruppe.

## 6.2. Normalschwingungen symmetrischer Punktgruppen

### E Einführung

*Normalschwingungen eines N-atomigen Moleküls*

Die Atome eines Moleküls führen Schwingungen um die Gleichgewichts- oder Ruhelage aus. Zur Darstellung der Schwingungen faßt man die einzelnen Atome als Massenpunkte auf und beschreibt ihre Auslenkung durch ein für jedes Teilchen selbständiges Koordinatensystem. Es wird durch drei im Ruhepunkt des Teilchens errichtete, zueinander senkrecht stehende Einheitsvektoren $\boldsymbol{e}_i$ definiert. Kennzeichnet $\xi_i$ die Auslenkung in der Richtung $\boldsymbol{e}_i$, so erhält man z. B. für den ersten Massenpunkt die Auslenkung

$$\xi_1\boldsymbol{e}_1 + \xi_2\boldsymbol{e}_2 + \xi_3\boldsymbol{e}_3 .$$

Dessen Masse ist mit $m_1 = m_2 = m_3$ bezeichnet.
Die Oszillationen aller Massenpunkte können gemäß

$$\boldsymbol{\xi}(t) = \sum_{i=1}^{3N} \xi_i(t)\, \boldsymbol{e}_i \tag{1}$$

zu einem $3N$-dimensionalen Vektor zusammengefaßt werden.
Für die kinetische Energie folgt

$$W_{\text{kin}} = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^{3N} m_i \dot{\xi}_i^2 . \tag{2}$$

Setzt man

$$x_i = \sqrt{m_i}\, \xi_i , \tag{3}$$

so werden die Massen $m_i$ aus der Bewegungsgleichung eliminiert, und für die kinetische Energie ergibt sich

$$W_{\text{kin}} = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^{3N} \dot{x}_i^2 . \tag{4}$$

Auf Grund von (3) definiert man die $3N$ linear unabhängigen Vektoren

$$\boldsymbol{b}_i = \sqrt{m_i}\, \boldsymbol{e}_i \tag{5}$$

als Basissystem eines $3N$-dimensionalen Vektorraumes $V$. Jeder Schwingungszustand kann als Linearkombination

$$\boldsymbol{X} = \boldsymbol{X}(t) = \sum_{i=1}^{3N} x_i \boldsymbol{b}_i \tag{6}$$

des Basissystems dargestellt werden. $\dot{\boldsymbol{X}}$ hat die Maßeinheit des Impulses, $\ddot{\boldsymbol{X}}$ die der Kraft. Die Komponenten $x_i$ werden zu dem Vektor

$$\boldsymbol{x} = \begin{pmatrix} x_1 \\ \vdots \\ x_{3N} \end{pmatrix} \tag{7}$$

zusammengefaßt. Er hat nicht die gleiche Maßeinheit wie $\boldsymbol{X}$. Für die potentielle Energie bei kleiner Oszillation geht man vom Ansatz einer quadratischen Form

$$W_{\text{pot}} = \frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^{3N} b_{ij} x_i x_j = \frac{1}{2} \boldsymbol{x}' \boldsymbol{B} \boldsymbol{x} \tag{8}$$

aus. Darin gilt $b_{ij} = b_{ji}$, d. h., $\boldsymbol{B}$ ist symmetrisch. Wird es durch die **orthogonale** Transformation

$$\boldsymbol{q} = \boldsymbol{A} \boldsymbol{x} \tag{9}$$

auf die **Hauptachsen** transformiert (vgl. 3.1.), so erhält man

$$\begin{aligned} W_{\text{kin}} &= \frac{1}{2} \dot{\boldsymbol{x}}' \dot{\boldsymbol{x}} = \frac{1}{2} (\boldsymbol{A}^{-1} \dot{\boldsymbol{q}})' \boldsymbol{A}^{-1} \dot{\boldsymbol{q}} = \frac{1}{2} \dot{\boldsymbol{q}}' \boldsymbol{A} \boldsymbol{A}^{-1} \dot{\boldsymbol{q}} \\ &= \frac{1}{2} \dot{\boldsymbol{q}}' \dot{\boldsymbol{q}} = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^{3N} \dot{q}_i^2, \end{aligned} \tag{9a}$$

$$W_{\text{pot}} = \frac{1}{2} \boldsymbol{q}' \boldsymbol{A} \boldsymbol{B} \boldsymbol{A}^{-1} \boldsymbol{q} = \frac{1}{2} \boldsymbol{q}' \boldsymbol{M} \boldsymbol{q} = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^{3N} c_i q_i^2. \tag{9b}$$

Darin bezeichnen die Koeffizienten $c_i$ die Eigenwerte der Matrix $\boldsymbol{B}$. Die zeitabhängigen Größen $q_i$ heißen **Normalkoordinaten.** Eine harmonische Schwingung

$$q_i = q_{i0} \, \mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega t} \tag{10}$$

heißt **Normalschwingung.** Sie ändert mit der Zeit $t$ nur ihren Ausschlag bzw. ihre Größe, nicht jedoch ihre Richtung.
Auch die Abweichungen in Normalkoordinaten können als $3N$-dimensionaler Vektor

$$\boldsymbol{X} = \boldsymbol{X}(t) = \sum q_i \boldsymbol{n}_i = \sum \boldsymbol{X}_i \tag{11}$$

zusammengefaßt werden, wobei die Basisvektoren $\boldsymbol{n}_i$ die Richtungen der Eigenvektoren gemäß 3.1. haben.

*Symmetrierassen*

Die Anwendung einer Symmetrieoperation $\sigma$ auf den Schwingungszustand bzw. die Auslenkung $\boldsymbol{X} = \boldsymbol{X}(t)$ ist nach 3.1. gleichbedeutend mit der linearen Transformation

$$\bar{\boldsymbol{X}} = \sigma \boldsymbol{X} = \sum \sigma x_i \boldsymbol{b}_i \qquad \text{bzw.} \qquad \sigma \boldsymbol{X} = \sum \sigma q_i \boldsymbol{n}_i \tag{12}$$

des Vektorraumes $V$. Dabei ist die $3N$-dimensionale Matrix vom verwendeten Basissystem abhängig.
Die Spur der Transformationsmatrix

$$\chi(\sigma) = sp\ \sigma \tag{13}$$

bleibt nach 3.1. bei der linearen Transformation des Basissystems invariant. Sie wird im folgenden als **Charakter** der Symmetrieoperation bezeichnet.
Es ist im allgemeinen nicht möglich, ein Basissystem zu finden, auf das bezogen sämtliche Symmetrieoperationen $\sigma_j$ der Gruppe diagonalisiert sind. Man kann jedoch sämtliche Symmetrieoperationen einer Gruppe nach dem Schema

$$\sigma_j = \begin{bmatrix} \begin{pmatrix} \\ \sigma_{j1} \\ \\ \end{pmatrix} & \begin{matrix} 0 & 0 & \cdots \\ & \cdot & \cdot\cdot \\ 0 & 0 & \cdots \end{matrix} \\ \begin{matrix} 0 \cdots 0 \\ \cdots \\ 0 \cdots 0 \end{matrix} & \begin{pmatrix} \\ \sigma_{j2} \\ \\ \end{pmatrix} \begin{matrix} \cdots \\ \cdots \\ \cdots \end{matrix} \\ & \cdots \end{bmatrix} \tag{14}$$

durch nicht weiter zerlegbare Teilmatrizen $\sigma_{ji}$ darstellen. Sie heißen irreduzible Matrizen und sind diagonal in der Matrix $\sigma_j$ angeordnet, während alle Elemente außerhalb davon verschwinden. Zu einem bestimmten Wert $i$ treten bei sämtlichen Symmetrieoperationen $\sigma_j$ die Matrizen $\sigma_{ji}$ in der gleichen Dimension auf. $\sigma_{ji}$ erfaßt aus der **Schwingung $X$** der Punktgruppe nur die Koordinaten, denen die Zeilen und Spalten von $\sigma_{ji}$ zugeordnet sind. Benutzt man als Basis die Normalkoordinaten nach (8), so ist die Darstellung der Schwingung stets irreduzibel.
(14) stellt die Symmetrie- bzw. Schwingungsrassen der Punktgruppe dar. Dafür werden die Bezeichnungen nach Tab. 6.2.1 verwendet.

**Tab. 6.2.1. Bezeichnung der Symmetrierassen**

| Kennzeichen | Schwingungsform | Erläuterung |
|---|---|---|
| $A$ | eindimensionale symmetrische Schwingung | Die $i$-ten Symmetrieoperationen $\sigma_{ji}$ sind für alle $j$ eindimensional. Bezeichnet $C_n$ die Hauptdrehachse, so ist $\chi(C_n) = 1$. |
| $B$ | eindimensionale antimetrische Schwingung | $\sigma_{ji}$ eindimensional, $\chi(C_n) = -1$. |
| $E$ | zweidimensionale Schwingung | $\sigma_{ji}$ hat die Dimension 2. Die Schwingung ist zweifach entartet. |
| $F$ | dreidimensionale Schwingung | $\sigma_{ji}$ hat die Dimension 3. Dreifach entartete Schwingung. |
| $G$ | vierdimensionale Schwingung | $\sigma_{ji}$ hat die Dimension 4. Die Schwingung ist vierfach entartet. |

Die Charaktersymbole werden mit $g$ indiziert, falls $\chi(\boldsymbol{i}) = 1$, mit $u$, falls $\chi(\boldsymbol{i}) = -1$ ist. Ein Strich bedeutet $\chi(\sigma_h) = 1$, zwei Striche kennzeichnen $\chi(\sigma_h) = -1$. Zahlenindizes dienen der weiteren Unterscheidung (vgl. Charaktertafeln Tab. 6.3.1).

**Beispiel 6.2.1. Nichtentartete symmetrische und antimetrische Schwingungen**

Das $Cl_2CO$-Molekül gehört der Gruppe $C_{2v}$ an (vgl. Bild 6.2.1). Bei der Schwingung $\nu_1$ bewegt sich das O-Atom auf der Verbindungsgeraden zum C-Atom hin, die $\boldsymbol{C}_2$-Achse ist. Das C-Atom hat die gleiche Richtung. Die beiden Cl-Atome laufen auf ihren Verbindungsgeraden zum C-Atom zu diesem hin.

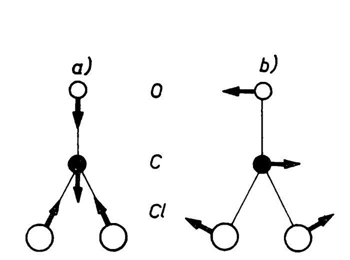



Bild 6.2.1. Schwingungen des $COCl_2$-Moleküls a) symmetrisch, b) antimetrisch

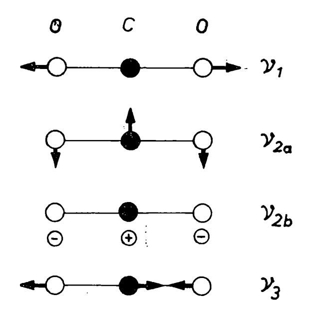



Bild 6.2.2. Normalschwingungen des $CO_2$-Moleküls

Drehung von 180° um die Hauptdrehachse ändert das Schwingungsbild nicht. Es bleibt auch bei vertikaler Spiegelung an der Ebene zwischen den beiden Cl-Atomen erhalten. Die Schwingung ist symmetrisch. Es liegt die Symmetrierasse $A$ vor.
Bei der Schwingung $\nu_2$ bewegt sich das O-Atom senkrecht zur $\boldsymbol{C}_2$-Achse. Das C-Atom läuft dazu entgegengerichtet. Die beiden Cl-Atome schwingen senkrecht zu ihren Verbindungsgeraden mit dem C-Atom, wobei die Komponenten in Richtung der $\boldsymbol{C}_2$-Achse entgegengesetzte Vorzeichen haben.
Eine Drehung $\boldsymbol{C}_2$ verändert sämtliche Schwingungsrichtungen dieser Normalschwingung um 180°. Die Schwingung ist antimetrisch. Es liegt die Symmetrierasse $B$ vor. Auch bei vertikaler Spiegelung werden die Vorzeichen umgekehrt.

**Beispiel 6.2.2. Normalschwingungen des $CO_2$-Moleküls**

Das $CO_2$-Molekül ist linear. Die Atome liegen im Ruhezustand auf einer Geraden. Es treten vier Normalschwingungen auf (vgl. Bild 6.2.2), die mit $\nu_1$, $\nu_{2a}$, $\nu_{2b}$, $\nu_3$ bezeichnet werden.
Bei der Schwingung $\nu_1$ bewegen sich die beiden O-Atome symmetrisch zum C-Atom auf der Molekülachse. Rotation um diese ändert die Lage der Teilchen nicht. Die Schwingung $\nu_1$ gehört der Symmetrierasse $A$ an. Auch die Spiegelung an der durch das C-Atom gehenden Ebene $\sigma_h$ bewirkt wegen der Gleichheit der Teilchen und der Symmetrie ihrer Bewegung keine Änderung. Sämtliche Symmetrieoperationen $\boldsymbol{\sigma}_{ji}$ sind eindimensional und von der Form $\boldsymbol{\sigma}_i q = q$.
Die Schwingungen $\nu_{2a}$ und $\nu_{2b}$ verlaufen senkrecht zur Molekülachse. Das C-Atom schwingt gegensinnig zu den beiden O-Atomen. Es tritt eine Deformation des im Ruhezustand linearen Moleküls auf. $\nu_{2a}$ und $\nu_{2b}$ sind energetisch äquivalent. Ihr Unterschied besteht nur in den verschiedenen Schwingungsebenen, die zueinander senkrecht stehen. Eine Drehung von 90° vertauscht die beiden Schwingungen miteinander. Die Phase bleibt dabei unberücksichtigt. Nach Tab. 6.2.1 werden die zweidimensionalen und zugleich zweifach entarteten Schwingungen mit $E$ bezeichnet.

Bei der eindimensionalen Schwingung $\nu_3$ bewegen sich die beiden O-Atome gegensinnig zur Bewegung des C-Atoms. Drehung um die Molekülachse führt zu keiner Änderung. Die Schwingung ist ebenfalls mit $A$ zu bezeichnen. Spiegelung $\sigma_h$ vertauscht die Vorzeichen, im Gegensatz zu $\nu_1$. $\nu_1$ wird daher mit $A'$, $\nu_3$ mit $A''$ bezeichnet.



## Probleme

### 6.2.1. Normalschwingung des zweiatomigen Moleküls

Für das zweiatomige Molekül ist die potentielle Energie kleiner Schwingungen als quadratische Funktion der Auslenkung $r - r_0$ aus dem Gleichgewichtsabstand $r_0$ gegeben:

$$W_{\text{pot}} = \frac{1}{2} D(r - r_0)^2. \tag{1}$$

Stellen Sie die Schwingung des zweiatomigen Moleküls in Normalkoordinaten dar.
Für das HCl-Molekül wird als Wellenzahl der Grundschwingung spektroskopisch $\frac{1}{\lambda} = 2{,}99 \times 10^4\,\text{m}^{-1}$ gemessen. Berechnen Sie daraus den Kraftkoeffizienten $D$ der gegenseitigen Bindung.

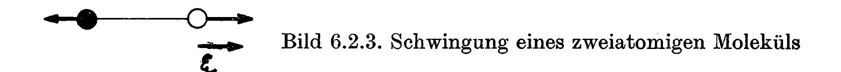


Bild 6.2.3. Schwingung eines zweiatomigen Moleküls

**Lösung:**

Wir wählen die Molekülachse als $\xi$-Achse. Die Auslenkung des ersten Atoms aus der Ruhelage vom zweiten Atom weg wird mit $\xi_1$, die des zweiten vom ersten weg mit $\xi_4$ bezeichnet. Die Einheitsvektoren $\boldsymbol{e}_1$ und $\boldsymbol{e}_4$ sind demnach entgegengerichtet (vgl. Bild 6.2.3). Der Schwerpunktsatz erfordert

$$m_1\xi_1 - m_4\xi_4 = 0, \tag{2}$$

wobei $m_1$ und $m_4$ die Massen der gegeneinander schwingenden Atome kennzeichnen. Für die potentielle Energie erhält man

$$W_{\text{pot}} = \frac{1}{2} D(\xi_1 + \xi_4)^2, \tag{3a}$$

für die kinetische

$$W_{\text{kin}} = \frac{m_1}{2}\dot{\xi}_1^2 + \frac{m_4}{2}\dot{\xi}_4^2. \tag{3b}$$

Durch die Transformation

$$x_1 = \sqrt{m_1}\,\xi_1, \qquad x_4 = \sqrt{m_4}\,\xi_4 \tag{4}$$

ergibt sich

$$W_{\text{kin}} = \frac{1}{2}(\dot{x}_1^2 + \dot{x}_4^2), \tag{5}$$

$$W_{\text{pot}} = \frac{1}{2} D \left(\frac{x_1}{\sqrt{m_1}} + \frac{x_4}{\sqrt{m_4}}\right)^2 = \frac{1}{2}(x_1 x_4) \begin{pmatrix} \frac{D}{m_1} & \frac{D}{\sqrt{m_1 m_4}} \\ \frac{D}{\sqrt{m_1 m_4}} & \frac{D}{m_4} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_4 \end{pmatrix}. \tag{6}$$

Zur Hauptachsentransformation $\boldsymbol{q} = \boldsymbol{A}\boldsymbol{x}$ hat man die quadratische Gleichung

$$\begin{vmatrix} \frac{D}{m_1} - c & \frac{D}{\sqrt{m_1 m_4}} \\ \frac{D}{\sqrt{m_1 m_4}} & \frac{D}{m_4} - c \end{vmatrix} = 0 \tag{7}$$

zu lösen. Ihre Wurzeln sind

$$c_1 = \frac{D}{m_1} + \frac{D}{m_4}, \qquad c_2 = 0. \tag{8}$$

Führt man die reduzierte Masse

$$m = \frac{m_1 m_4}{m_1 + m_4} \tag{9}$$

ein, so kann man $c_1$ auch

$$c_1 = \frac{D}{m} \tag{10}$$

schreiben.
In Normalkoordinaten hängt die potentielle Energie der Schwingungen nur von einer Komponente ab, die wir mit $q_1$ bezeichnen. Wegen des Verschwindens der zweiten Wurzel liefert die zweite Normalkoordinate $q_2$ nach (6.2./9b) keinen Beitrag zur potentiellen Energie. Für diese erhalten wir

$$W_{\text{pot}} = \frac{D}{2m} q_1^2. \tag{11}$$

Die kinetische Energie ist nach (6.2.9a) durch

$$W_{\text{kin}} = \frac{1}{2} (\dot{q}_1^2 + \dot{q}_2^2) \tag{12}$$

gegeben.
Wir leiten die Bewegungsgleichungen aus den **Lagrangeschen Gleichungen**

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t} \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} - \frac{\partial L}{\partial q_i} = 0 \qquad (i = 1, 2) \tag{13}$$

ab, worin

$$L = W_{\text{kin}} - W_{\text{pot}} = \frac{1}{2} (\dot{q}_1^2 + \dot{q}_2^2) - \frac{D}{2m} q_1^2 \tag{14}$$

die Lagrangesche Funktion bedeutet.
Für die erste Schwingung ergibt sich aus (13) und (14)

$$\ddot{q}_1 + \frac{D}{m} q_1 = 0, \tag{15}$$

für die zweite

$$\ddot{q}_2 = 0. \tag{16}$$

Als allgemeine Lösungen erhält man

$$q_1 = A_{11}\, \mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega_0 t} + A_{12}\, \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega_0 t}, \qquad q_2 = A_{21} + A_{22} t. \tag{17}$$

Darin ist

$$\omega_0 = \sqrt{\frac{D}{m}}. \tag{18}$$

Während durch $q_1$ eine Oszillation dargestellt wird, repräsentiert bei $q_2$ der konstante Summand $A_{21}$ eine Rotation, der lineare Summand $A_{22}t$ eine Translation. Es liegt somit nur eine Normalschwingung vor. Die Verknüpfung der Normalkoordinaten $q_1$ und $q_2$ mit $x_1$ und $x_4$ erfolgt nach 3.1.:

$$\boldsymbol{A} \cdot \boldsymbol{B} \cdot \boldsymbol{A}^{-1} = \boldsymbol{C} \qquad \text{bzw.} \qquad \boldsymbol{A} \cdot \boldsymbol{B} = \boldsymbol{C} \cdot \boldsymbol{A}. \tag{19}$$

Darin ist

$$\boldsymbol{A} = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{12} & a_{22} \end{pmatrix} \tag{20}$$

eine Orthogonalmatrix. Aus (19) und (6) erhalten wir nach Einsetzen von $c_1$

$$\begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{12} & a_{22} \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} \frac{1}{m_1} & \frac{1}{\sqrt{m_1 m_4}} \\ \frac{1}{\sqrt{m_1 m_4}} & \frac{1}{m_4} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{1}{m_1} + \frac{1}{m_4} & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{12} & a_{22} \end{pmatrix}. \tag{21}$$

Durch Ausmultiplizieren und Einsetzen folgen zweimal die beiden Gleichungen

$$\frac{a_{11}}{a_{12}} = \sqrt{\frac{m_4}{m_1}}, \qquad \frac{a_{12}}{a_{22}} = -\sqrt{\frac{m_1}{m_4}}. \tag{22}$$

Für die Orthogonalmatrix $\boldsymbol{A}$ kann man daher

$$\boldsymbol{A} = \frac{1}{\sqrt{m_1 + m_4}} \begin{pmatrix} \sqrt{m_4} & \sqrt{m_1} \\ \sqrt{m_1} & -\sqrt{m_4} \end{pmatrix} \tag{23}$$

schreiben. Hieraus ergibt sich für die Normalkoordinate der Oszillation

$$q_1 = \frac{\sqrt{m_4}\, x_1 + \sqrt{m_1}\, x_4}{\sqrt{m_1 + m_4}} = \sqrt{m}\,(\xi_1 + \xi_4). \tag{24}$$

Die Auslenkungen $\xi_1$ und $\xi_4$ folgen auf Grund der allgemeinen Lösung (17) und des Schwerpunktsatzes (1).

Für den Kraftkoeffizienten $D$ erhält man aus (18) mit den vorgegebenen Werten

$$D = m\omega_0{}^2 = \frac{m_1 m_4}{m_1 + m_4} \frac{4\pi^2}{\lambda^2} c^2 \tag{25}$$

$$= \frac{1 \cdot 35{,}5 \cdot 1{,}67 \cdot 10^{-27}}{1 + 35{,}5} \cdot 4\pi^2 (3 \cdot 10^8)^2 \cdot (2{,}99 \cdot 10^4)^2 \text{ kg s}^{-2} = 5{,}16 \text{ N m}^{-1}.$$

Die Einführung weiterer Koordinaten $\xi_2$, $\xi_3$, ... ändert nichts am Ergebnis, daß das System nur eine Oszillation aufweist.

## 6.2.2. Reduzible Darstellung der Symmetrieoperationen

Die Zuordnung je einer vom Basissystem $\boldsymbol{b}_1, \boldsymbol{b}_2, \ldots, \boldsymbol{b}_{3N}$ abhängigen Matrix $\boldsymbol{\sigma}$ zu jeder Symmetrieoperation $\boldsymbol{\sigma}$ des vorgegebenen Punktsystems heißt reduzible Darstellung der Symmetriegruppe $G$ oder Darstellung des Vektorraumes $V$ als $G$-Raum.

Beim Molekül der Traubensäure $C_2H_2(OH)_2(COOH)_2$, dessen Struktur aus Bild 6.2.4 zu ersehen ist, können die beiden Bausteine CH—OH—COOH durch Punktspiegelung $\boldsymbol{i}$ am Inversionszentrum zur Deckung gebracht werden. Außer der identischen Operation **1** existieren sonst keine Symmetrieelemente.
Stellen Sie den Vektorraum $V$ der Schwingungen dieser Punktgruppe als $G$-Raum dar, wenn jeder Komplex CH—OH—COOH als starr angesehen wird.

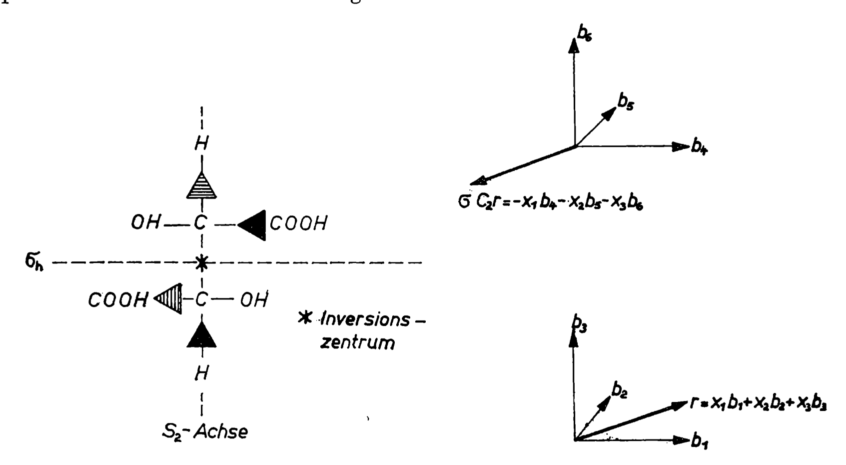



Bild 6.2.4. $C_i$-Symmetrie des $(CHOHCOOH)_2$-Moleküls

Bild 6.2.5. Inversion bei raumfesten Achsen

**Lösung:**

Der Vektorraum ist wegen der zwei aus mehreren Atomen zusammengesetzten Bausteine sechsdimensional. Die in den beiden Schwerpunkten errichteten Basissysteme $\boldsymbol{b}_1$, $\boldsymbol{b}_2$, $\boldsymbol{b}_3$ und $\boldsymbol{b}_4$, $\boldsymbol{b}_5$, $\boldsymbol{b}_6$ seien in der Reihenfolge fortlaufender Numerierung Rechtssysteme. Die Achsen $\boldsymbol{b}_1$, $\boldsymbol{b}_4$, ebenso $\boldsymbol{b}_2$, $\boldsymbol{b}_5$ und $\boldsymbol{b}_3$, $\boldsymbol{b}_6$, seien zueinander parallel. Wegen der Proportionalität der Länge des Basisvektors $\boldsymbol{b}_i$ mit $\sqrt{m_i}$ gilt

$$\frac{|\boldsymbol{b}_1|}{|\boldsymbol{b}_4|} = \frac{|\boldsymbol{b}_2|}{|\boldsymbol{b}_5|} = \frac{|\boldsymbol{b}_3|}{|\boldsymbol{b}_6|} = \sqrt{\frac{m_1}{m_4}} = \sqrt{\frac{m_2}{m_5}} = \sqrt{\frac{m_3}{m_6}} = 1. \tag{1}$$

Setzt man

$$|\boldsymbol{b}_1| = |\boldsymbol{b}_2| = |\boldsymbol{b}_3| = \boldsymbol{b}_0, \tag{2}$$

so folgt auch

$$|\boldsymbol{b}_4| = |\boldsymbol{b}_5| = |\boldsymbol{b}_6| = \boldsymbol{b}_0. \tag{3}$$

Es sei

$$\boldsymbol{r}_1 = x_1\boldsymbol{b}_1 + x_2\boldsymbol{b}_2 + x_3\boldsymbol{b}_3 \tag{4}$$

die Auslenkung des Bausteins 1 zur Zeit $t$.
Im Ruhezustand bedeutet die Punktspiegelung $\boldsymbol{i}$ nach Bild 6.2.5

$$\boldsymbol{i} = \boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{C}_2 = (1\ \ 2), \tag{5}$$

führt also den Baustein 1 in den Ursprungspunkt der Basis $\boldsymbol{b}_4$, $\boldsymbol{b}_5$, $\boldsymbol{b}_6$, den Baustein 2 in den Ursprungspunkt der Basis $\boldsymbol{b}_1$, $\boldsymbol{b}_2$, $\boldsymbol{b}_3$ über. Die Basissysteme seien raumfest, bleiben bei den Symmetrieoperationen auf das Punktsystem also unverändert.

Die Drehoperation $\boldsymbol{C}_2$ um die $\boldsymbol{b}_3$- bzw. $\boldsymbol{b}_6$-Achse bedeutet für den dreidimensionalen Schwingungsvektor $\boldsymbol{r}_1(t)$

$$\boldsymbol{C}_2\boldsymbol{r}_1 = -x_1\boldsymbol{b}_1 - x_2\boldsymbol{b}_2 + x_3\boldsymbol{b}_3,$$

d. h., es werden die Vorzeichen von $x_1$ und $x_2$ umgekehrt, während das von $x_3$ fest bleibt. Bei der nachfolgenden Spiegelung an der durch das Inversionszentrum gehenden horizontalen Spiegelebene wird der Punkt 1 in das Koordinatensystem $\boldsymbol{b}_4$, $\boldsymbol{b}_5$, $\boldsymbol{b}_6$ transformiert und gleichzeitig das Vorzeichen seiner $x_3$-Koordinate umgekehrt:

$$\boldsymbol{i}\boldsymbol{r}_1 = \sigma\boldsymbol{C}_2\boldsymbol{r}_1 = -x_1\boldsymbol{b}_4 - x_2\boldsymbol{b}_5 - x_3\boldsymbol{b}_6. \tag{6}$$

Für den Baustein 2 erhält man in gleicher Weise

$$\boldsymbol{i}\boldsymbol{r}_2 = \sigma\boldsymbol{C}_2\boldsymbol{r}_2 = -x_4\boldsymbol{b}_1 - x_5\boldsymbol{b}_2 - x_6\boldsymbol{b}_3. \tag{7}$$

Bei der Symmetrieoperation $\boldsymbol{i}$ geht damit der Schwingungsvektor $\boldsymbol{X} = \boldsymbol{X}(t)$ in

$$\boldsymbol{i}\boldsymbol{X} = -x_4\boldsymbol{b}_1 - x_5\boldsymbol{b}_2 - x_6\boldsymbol{b}_3 - x_1\boldsymbol{b}_4 - x_2\boldsymbol{b}_5 - x_3\boldsymbol{b}_6 \tag{8}$$

über. Die identische Operation $\mathbf{1}$ läßt alles unverändert:

$$\mathbf{1}\boldsymbol{X} = x_1\boldsymbol{b}_1 + x_2\boldsymbol{b}_2 + x_3\boldsymbol{b}_3 + x_4\boldsymbol{b}_4 + x_5\boldsymbol{b}_5 + x_6\boldsymbol{b}_6. \tag{9}$$

In Matrizen folgt

$$\boldsymbol{i} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -1 \\ -1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \tag{10}$$

$$\mathbf{1} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}. \tag{11}$$

### 6.2.3. Irreduzible Darstellung der Normalschwingungen des $CO_2$-Moleküls

Wenden Sie auf die Normalschwingungen des $CO_2$-Moleküls nach Beispiel 6.2.2 und Bild 6.2.2 die Symmetrieoperationen der Drehung $\boldsymbol{C}_4$ und der Drehung $\boldsymbol{C}_4^2 = \boldsymbol{C}_2$ um die Hauptsymmetrieachse, der horizontalen Spiegelung $\boldsymbol{\sigma}_\mathrm{h}$, der vertikalen Spiegelung $\boldsymbol{\sigma}_\mathrm{v}$ und der Inversion $\boldsymbol{i} = \boldsymbol{C}_2\boldsymbol{\sigma}_\mathrm{h}$ an. Untersuchen Sie die irreduziblen Matrizen der Symmetrieoperationen und bestimmen Sie ihre Spuren.

**Lösung:**

Die Auslenkung der beiden O-Atome in Richtung der Molekülachse werde mit $\xi_1$ und $\xi_7$, die des C-Atoms mit $\xi_4$ bezeichnet. In Richtung der Molekülachse überlagern sich die beiden Schwingungen $\nu_1$ und $\nu_3$. Das C-Atom bewegt sich jedoch in dieser Richtung nur auf Grund der Normal-

schwingung $\nu_3$. Seine Auslenkung kann daher zur Kennzeichnung dieser Normalschwingung dienen. Dementsprechend beschreiben wir $\nu_3$ durch

$$\xi_{III} = \xi_4 . \tag{1}$$

Die Bewegung der beiden O-Atome durch $\nu_3$ ergibt sich nach dem Satz von der Erhaltung des Schwerpunktes. Wegen

$$(\xi_1)_{\nu_3} = (\xi_7)_{\nu_3} \tag{2}$$

muß

$$2m_O(\xi_1)_{\nu_3} + m_C\xi_{III} = 0 \tag{3}$$

gelten, woraus

$$(\xi_1)_{\nu_3} = (\xi_7)_{\nu_3} = -\frac{m_C}{2m_O}\,\xi_4 \tag{4}$$

folgt.
$m_O$ und $m_C$ bezeichnen die Masse des O- bzw. des C-Atoms. Zieht man die Schwingung $\nu_3$ von der Auslenkung $\xi_1 = \xi_1(t)$ ab, so bleibt als Bewegung unter dem Einfluß der Schwingung $\nu_1$:

$$(\xi_1)_{\nu_1} = \xi_1 - (\xi_1)_{\nu_3} = \xi_1 + \frac{m_C}{2m_O}\,\xi_4 . \tag{5}$$

Dieselbe Gleichung gilt für $\xi_7$. Wir definieren daher

$$\xi_I = (\xi_1)_{\nu_1} - (\xi_7)_{\nu_1} \tag{6}$$

und erhalten unter Berücksichtigung von (5)

$$\xi_I = \xi_1 - \xi_7 . \tag{7}$$

In der Schwingung $\nu_{2a}$ werden die Schwingungen der beiden O-Atome mit

$$\xi_{IIa} = \xi_2 = \xi_8 \tag{8}$$

bezeichnet. Nach dem Schwerpunktsatz folgt für die Koordinate $\xi_5$ des C-Atoms

$$\xi_5 = -\frac{2m_O}{m_C}\,\xi_{IIa} . \tag{9}$$

Für die $\nu_{2b}$-Schwingung erhält man analog

$$\xi_{IIb} = \xi_3 = \xi_9 , \tag{10}$$

$$\xi_6 = -\frac{2m_O}{m_C}\,\xi_{IIb} . \tag{11}$$

Die Drehung $\boldsymbol{C}(\varphi)$ des Moleküls verändert $\xi_I$ und $\xi_{III}$ nicht:

$$\bar{\xi}_I = \boldsymbol{C}_I(\varphi)\,\xi_I = \xi_I , \qquad \bar{\xi}_{III} = \boldsymbol{C}_{III}(\varphi)\,\xi_{III} = \xi_{III} . \tag{12}$$

Für die Auslenkungen $\xi_{IIa}$ und $\xi_{IIb}$ nach der Drehung $\boldsymbol{C}(\varphi)$ folgt dagegen

$$\begin{pmatrix}\bar{\xi}_{IIa}\\ \bar{\xi}_{IIb}\end{pmatrix} = \begin{pmatrix}\cos\varphi & \sin\varphi\\ -\sin\varphi & \cos\varphi\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\xi_{IIa}\\ \xi_{IIb}\end{pmatrix} = \boldsymbol{C}_{II}\begin{pmatrix}\xi_{IIa}\\ \xi_{IIb}\end{pmatrix} . \tag{13}$$

Die Spuren dieser Operationen bzw. irreduziblen Matrizen sind

$$sp\boldsymbol{C}_I = 1 , \qquad sp\boldsymbol{C}_{III} = 1 , \tag{14}$$

unabhängig vom Drehwinkel,

$$sp\boldsymbol{C}_{\mathrm{II}} = sp\begin{pmatrix} \cos\varphi & \sin\varphi \\ -\sin\varphi & \cos\varphi \end{pmatrix} = 2\cos\varphi, \tag{15}$$

d. h.

$$sp\boldsymbol{C}_{\mathrm{II}}\left(\frac{\pi}{2}\right) = 0, \qquad sp\boldsymbol{C}_{\mathrm{II}}(\pi) = -2. \tag{15a}$$

Bei der horizontalen Spiegelung geht $\xi_1$ in $-\xi_7$, $-\xi_7$ in $\xi_1$ über, so daß die Schwingung $\nu_1$ nach (6) unverändert bleibt. Auch die senkrecht zur Hauptsymmetrieachse erfolgenden zweidimensionalen Schwingungen $\nu_{2a}$ und $\nu_{2b}$ bleiben unbeeinflußt. Dagegen ändert $\xi_{\mathrm{III}}$ nach (1) sein Vorzeichen. Es folgt daher für die Spuren der irreduziblen Matrizen

$$sp\boldsymbol{\sigma}_{\mathrm{hI}} = 1, \qquad sp\boldsymbol{\sigma}_{\mathrm{hII}} = 2, \qquad sp\boldsymbol{\sigma}_{\mathrm{hIII}} = -1. \tag{16}$$

Vertikale Spiegelung ändert $\xi_{\mathrm{I}}$ und $\xi_{\mathrm{III}}$ nicht. Um die Transformation bei einer unter dem Winkel $\alpha$ gegen die $\xi_{\mathrm{IIa}}$-Achse geneigten $\boldsymbol{\sigma}_{\mathrm{v}}$-Ebene zu berechnen, hat man den Spiegelungsoperator in dem um $\alpha$ verdrehten Koordinatensystem auf das $\xi_{\mathrm{IIa}}$, $\xi_{\mathrm{IIb}}$-System zu transformieren und erhält

$$\begin{pmatrix} \bar{\xi}_{\mathrm{IIa}} \\ \bar{\xi}_{\mathrm{IIb}} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos\alpha & -\sin\alpha \\ \sin\alpha & \cos\alpha \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \cos\alpha & \sin\alpha \\ -\sin\alpha & \cos\alpha \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \xi_{\mathrm{IIa}} \\ \xi_{\mathrm{IIb}} \end{pmatrix}. \tag{17}$$

Hieraus ergibt sich

$$\boldsymbol{\sigma}_{\mathrm{vII}} = \begin{pmatrix} \cos 2\alpha & \sin 2\alpha \\ \sin 2\alpha & -\cos 2\alpha \end{pmatrix}. \tag{18}$$

Die Spuren der irreduziblen Darstellung sind

$$sp\boldsymbol{\sigma}_{\mathrm{vI}} = 1, \qquad sp\boldsymbol{\sigma}_{\mathrm{vII}} = 0, \qquad sp\boldsymbol{\sigma}_{\mathrm{vIII}} = 1. \tag{19}$$

Für die Inversion $\boldsymbol{i} = \boldsymbol{C}(\pi)\,\boldsymbol{\sigma}_{\mathrm{v}}$ folgt

$$\boldsymbol{i}_{\mathrm{I}} = (1)\,(1) = (1), \qquad sp\boldsymbol{i}_{\mathrm{I}} = 1, \tag{20}$$

$$\boldsymbol{i}_{\mathrm{II}} = \begin{pmatrix} -1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}, \qquad sp\boldsymbol{i}_{\mathrm{II}} = -2, \tag{21}$$

$$\boldsymbol{i}_{\mathrm{III}} = (1)\,(-1) = (-1), \qquad sp\boldsymbol{i}_{\mathrm{III}} = -1. \tag{22}$$

### 6.2.4. Charakter einer Symmetrieoperation bezüglich der vollständigen Punktgruppe

Stellen Sie eine allgemeingültige Formel zur Berechnung der Spuren von Symmetrieoperationen an einer Punktmenge auf. Berechnen Sie die Spuren der Symmetrieoperationen am $NH_3$-Molekül.

**Lösung:**

Wir gehen von einem in den Ruhepunkten der Gleichgewichtslage errichteten Basisystem $\boldsymbol{b}_1, \boldsymbol{b}_2, \ldots, \boldsymbol{b}_{3N}$ aus. Auf dieses werden die Symmetrieoperationen $\boldsymbol{\sigma}$ angewandt, während die schwingenden Massenpunkte davon unbeeinflußt bleiben. Wir schreiben daher bezüglich der

Transformation des Basisvektors $\boldsymbol{b}_i$

$$\sigma \boldsymbol{b}_i = \sum_{j=1}^{3N} a_{ij} \boldsymbol{b}_j . \tag{1}$$

Wird ein Basisvektor $\boldsymbol{b}_i$ durch $\sigma$ aus seinem Ursprungspunkt in einen anderen übergeführt, so läßt er sich durch Linearkombination der übrigen Basisvektoren in diesem Punkt darstellen, und es folgt $a_{ii} = 0$. Zur Spur des Operators $\sigma$ leisten daher nur die Basisvektoren einen Beitrag, deren Ursprungspunkte durch die Symmetrieoperation $\sigma$ nicht verändert werden. Bezeichnet $k = k(\sigma)$ die Anzahl der Punkte, die bei der Symmetrieoperation $\sigma$ nicht verändert werden, so folgt

$$\boxed{sp\sigma = k(\sigma)\, sp^{(3)}\sigma}, \tag{2}$$

wobei $sp^{(3)}\sigma$ die Spur der Symmetrieoperation im dreidimensionalen Raum kennzeichnet. (2) umfaßt die gesamte Punktmenge und hier sowohl **Schwingungen** als auch **Rotationen** und **Translationen.**
Nach 3.1. ist für eine Drehung

$$sp^{(3)}\boldsymbol{C}(\varphi) = 1 + 2 \cos \varphi . \tag{3}$$

Damit wird auch die identische Operation **1** erfaßt, für die $\varphi = 0$ ist:

$$sp^{(3)}\boldsymbol{1} = 3 . \tag{3a}$$

Für die Drehspiegelung $\boldsymbol{S}_k$ folgt nach 3.1.

$$sp^{(3)}\boldsymbol{S}_k = -1 + 2 \cos \frac{2\pi}{k} , \tag{4}$$

speziell für die Spiegelung mit $k = 1$

$$sp^{(3)}\sigma_\text{v} = sp^{(3)}\sigma_\text{h} = 1 , \tag{4a}$$

für die Inversion $\boldsymbol{i} = \boldsymbol{S}_2$

$$sp^{(3)}\boldsymbol{i} = -3 . \tag{4b}$$

Das $NH_3$-Molekül gehört nach 6.1.6. und 6.1.2. der Symmetriegruppe $C_{3\text{v}}$ mit den Symmetrieoperationen $\boldsymbol{1}$, $\boldsymbol{C}_3$, $\boldsymbol{C}_3^2$, $\sigma_\text{v}$, $\sigma_\text{v}'$, $\sigma_\text{v}''$ an. Nach (3) ist $sp^{(3)}\boldsymbol{C}_3 = sp^{(3)}\boldsymbol{C}_3^2 = 1 + 2(-0{,}5) = 0$. Diese Drehungen lassen nur das N-Atom fest, so daß

$$k(\boldsymbol{C}_3) = k(\boldsymbol{C}_3^2) = 1 , \qquad sp\boldsymbol{C}_3 = sp\boldsymbol{C}_3^2 = 1 \cdot 0 = 0$$

folgt. Bei jeder der drei Spiegelungen bleiben ein H-Atom und das N-Atom fest. Damit ergibt sich mittels (4a)

$$k(\sigma_\text{v}) = 2 , \qquad sp\sigma_\text{v} = 2 \cdot 1 = 2 .$$

Für die identische Operation ist $k(\boldsymbol{1}) = 4$ und damit nach (3a)

$$sp\boldsymbol{1} = 4 \cdot 3 = 12 .$$

### 6.2.5. Charakter einer Symmetrieoperation bezüglich der eigentlichen Schwingungen

Ein Körper aus $N$ Massenpunkten enthält 3 Freiheitsgrade der Translation und 3 Freiheitsgrade der Rotation (bei linearen Molekülen nur zwei). Sie sind als uneigentliche Schwingungen von den $3N$ Freiheitsgraden der Punktgruppe abzuziehen.

Stellen Sie die Formel zur Berechnung der Spuren von Symmetrieoperationen auf, wenn nur die eigentlichen Schwingungen erfaßt werden. Berechnen Sie die Spuren dieser Symmetrieoperationen für das $NH_3$-Molekül.

**Lösung:**

Die drei Koordinaten der Translation transformieren sich wie die Koordinaten der Oszillation. Der Charakter einer Translation des Moleküls ist daher nach (6.2.4./3) bei Drehungen (einschl. 1)

$$\chi_T(\boldsymbol{C}_n) = sp^{(T)}\boldsymbol{C}_n = 1 + 2\cos\frac{2\pi}{n}, \tag{1}$$

nach (6.2.4./4) bei Drehspiegelungen

$$\chi_T(\boldsymbol{S}_n) = sp^{(T)}\boldsymbol{S}_n = -1 + 2\cos\frac{2\pi}{n}. \tag{2}$$

Sollen also Translationen nicht erfaßt werden, so ist die in (6.2.4./2) eingeführte Anzahl $k = k(\sigma)$ der Punkte, die bei Symmetrieoperationen nicht verändert werden, um eins zu vermindern. Diese Regel gilt für sämtliche Symmetrieoperationen.
Drehungen der gesamten Punktgruppe sind allgemein durch den Rotationsvektor

$$\mathrm{d}\boldsymbol{w} = \boldsymbol{r} \times \mathrm{d}\boldsymbol{r} = \begin{pmatrix} y\,\mathrm{d}z - z\,\mathrm{d}y \\ z\,\mathrm{d}x - x\,\mathrm{d}z \\ x\,\mathrm{d}y - y\,\mathrm{d}x \end{pmatrix} \tag{3}$$

gekennzeichnet. Darin bezeichnet $\boldsymbol{r} = (x, y, z)$ den Vektor vom Achsenpunkt zum betrachteten Punkt des Moleküls, $\mathrm{d}\boldsymbol{r}$ den Verschiebungsvektor infolge der Rotation. Eine Symmetrieoperation $\boldsymbol{C}_n = \boldsymbol{C}_n(\varphi)$ bzw. $\boldsymbol{S}_n = \boldsymbol{S}_n(\varphi)$ transformiert $\boldsymbol{r}$ und $\mathrm{d}\boldsymbol{r}$ gemäß

$$\left.\begin{aligned} \boldsymbol{r}' &= \begin{pmatrix} \cos\varphi & \sin\varphi & 0 \\ -\sin\varphi & \cos\varphi & 0 \\ 0 & 0 & \pm 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix}, \\ \mathrm{d}\boldsymbol{r}' &= \begin{pmatrix} \cos\varphi & \sin\varphi & 0 \\ -\sin\varphi & \cos\varphi & 0 \\ 0 & 0 & \pm 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathrm{d}x \\ \mathrm{d}y \\ \mathrm{d}z \end{pmatrix}, \end{aligned}\right\} \tag{4}$$

wobei die Drehachse der Symmetrieoperation $\boldsymbol{C}$ bzw. $\boldsymbol{S}$ als $z$-Achse gewählt ist. Für den Rotationsvektor $\mathrm{d}\boldsymbol{w}'$ nach Ausführung der Symmetrieoperation erhält man

$$\mathrm{d}\boldsymbol{w}' = \boldsymbol{r}' \times \mathrm{d}\boldsymbol{r}' = \begin{vmatrix} \boldsymbol{i} & \boldsymbol{j} & \boldsymbol{k} \\ x\cos\varphi + y\sin\varphi & -x\sin\varphi + y\cos\varphi & \pm z \\ \mathrm{d}x\cos\varphi + \mathrm{d}y\sin\varphi & -\mathrm{d}x\sin\varphi + \mathrm{d}y\cos\varphi & \pm\mathrm{d}z \end{vmatrix}. \tag{5}$$

Hierfür kann man

$$\begin{aligned} \mathrm{d}\boldsymbol{w}' &= \begin{pmatrix} \pm\cos\varphi & \pm\sin\varphi & 0 \\ \mp\sin\varphi & \pm\cos\varphi & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} y\,\mathrm{d}z - z\,\mathrm{d}y \\ z\,\mathrm{d}x - x\,\mathrm{d}z \\ x\,\mathrm{d}y - y\,\mathrm{d}x \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} \pm\cos\varphi & \pm\sin\varphi & 0 \\ \mp\sin\varphi & \pm\cos\varphi & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \mathrm{d}\boldsymbol{w} \end{aligned} \tag{6}$$

schreiben.

Die Anwendung einer Symmetrieoperation auf die Rotation wird hiernach durch eine Transformationsmatrix auf den Rotationsvektor $d\boldsymbol{w}$ ausgedrückt, deren Spur bei Drehungen $\boldsymbol{C}_n$ durch

$$\chi_{\mathrm{R}}(\boldsymbol{C}_n) = sp^{(\mathrm{R})}\boldsymbol{C}_n = 1 + 2\cos\varphi, \tag{7}$$

bei Drehspiegelungen $\boldsymbol{S}_n$ (einschl. Spiegelungen und der Inversion) durch

$$\chi_{\mathrm{R}}(\boldsymbol{S}_n) = sp^{(\mathrm{R})}\boldsymbol{S}_n = 1 - 2\cos\varphi = -(-1 + 2\cos\varphi) \tag{8}$$

gegeben ist. Soll daher auch der Einfluß der Rotation auf den Charakter der Symmetrieoperation ausgeschaltet werden, so ist bei allen Symmetrieoperationen der Drehung (einschl. $\mathbf{1}$) $1 + 2\cos\varphi$, bei Symmetrieoperationen der Drehspiegelung (einschl. Spiegelung) dagegen $1 - 2\cos\varphi$ abzuziehen. Die Größe $k = k(\boldsymbol{\sigma})$ in (6.2.4./2) ist daher bei Drehungen $\boldsymbol{C}_n$ nochmals um eins zu vermindern, dagegen bei Drehspiegelungen $\boldsymbol{S}_n$ um eins zu erhöhen.
Der Charakter von Symmetrieoperationen bezüglich der eigentlichen Schwingungen einer Punktgruppe ergibt sich daher nach (6.2.4/2), wenn $k$ wie folgt eingesetzt wird: Bei Drehungen $\boldsymbol{C} = \boldsymbol{C}(\varphi)$ (einschl. $\mathbf{1}$) ist die Anzahl festbleibender Punkte um zwei zu vermindern, bei Drehspiegelungen $\boldsymbol{S} = \boldsymbol{S}(\varphi)$ (einschl. Spiegelungen und der Inversion) bleibt sie unverändert:

$$\boxed{\chi'(\boldsymbol{\sigma}) = sp\boldsymbol{\sigma} = k'(\boldsymbol{\sigma})\, sp^{(3)}\boldsymbol{\sigma} \begin{cases} k' = k - 2 & \text{für} \quad \boldsymbol{\sigma} = \boldsymbol{C}_n \\ k' = k & \text{für} \quad \boldsymbol{\sigma} = \boldsymbol{S}_n \end{cases}}\,. \tag{9}$$

Für das $NH_3$-Molekül erhält man (vgl. 6.2.4.)

$$\begin{aligned} k'(\mathbf{1}) &= k - 2 = 2, & \chi' &= sp\mathbf{1} = 2 \cdot 3 = 6; \\ k'(\boldsymbol{C}_3) &= k - 2 = -1, & \chi' &= sp\boldsymbol{C}_3 = (-1) \cdot 0 = 0; \\ k'(\boldsymbol{\sigma}_{\mathrm{V}}) &= k = 2, & \chi' &= sp\boldsymbol{\sigma}_{\mathrm{V}} = 2 \cdot 1 = 2. \end{aligned}$$

Die Anteile von Translation und Rotation betragen

$$\begin{aligned} \chi_{\mathrm{T}}(\mathbf{1}) &= 3, & \chi_{\mathrm{R}}(\mathbf{1}) &= 3, \\ \chi_{\mathrm{T}}(\boldsymbol{C}_3) &= 0, & \chi_{\mathrm{R}}(\boldsymbol{C}_3) &= 0, \\ \chi_{\mathrm{T}}(\boldsymbol{\sigma}_{\mathrm{V}}) &= 1, & \chi_{\mathrm{R}}(\boldsymbol{\sigma}_{\mathrm{V}}) &= -1. \end{aligned}$$

**A**

## Aufgaben

A 6.2.1. Für molekularen Wasserstoff wird als Wellenzahl der Grundschwingung $\frac{1}{\lambda} = 4{,}39 \times 10^5\ \mathrm{m}^{-1}$ gemessen. Berechnen Sie den Kraftkoeffizienten der gegenseitigen Anziehung beider schwingenden Massen.

A 6.2.2. Für die Eigenschwingungen des $CO_2$-Moleküls werden die folgenden Wellenzahlen gemessen: $\nu_1$: 1388 cm$^{-1}$, $\nu_2$: 667,3 cm$^{-1}$, $\nu_3$: 2349 cm$^{-1}$. Berechnen Sie die Kraftkoeffizienten.

A 6.2.3. Bestimmen Sie die Spuren folgender Symmetrieoperationen im dreidimensionalen Raum: $\boldsymbol{C}_6$, $\boldsymbol{C}_8$, $\boldsymbol{C}_{12}$, $\boldsymbol{S}_3$, $\boldsymbol{S}_4$, $\boldsymbol{S}_6$, $\boldsymbol{S}_8$, $\boldsymbol{S}_{12}$.

A 6.2.4. Bestimmen Sie die Spuren der Symmetrieoperationen am $H_2O$-Molekül.

A 6.2.5. Untersuchen Sie, welche Symmetrieoperationen am Benzolring $C_6H_6$ Punkte fest lassen, und bestimmen Sie danach die Spuren sämtlicher Symmetrieoperationen an dieser Punktgruppe.

A 6.2.6. Naphthalin $C_{10}H_8$ hat die Struktur nach Bild 6.2.6. Bestimmen Sie die Charaktere der Symmetrieoperationen $\mathbf{1}$, $C_2(x)$, $C_2(y)$, $C_2(z)$, $\sigma_x$, $\sigma_y$, $\sigma_z$, $i$, wenn die Bewegung der gesamten Punktgruppe erfaßt wird.

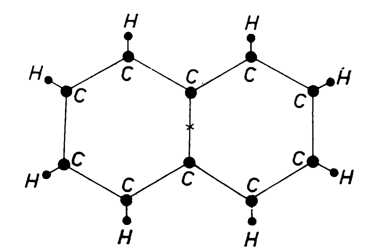



Bild 6.2.6. Struktur des $C_{10}H_8$-Moleküls (Naphthalin)

A 6.2.7. Berechnen Sie für Naphthalin die Spur der Symmetrieoperationen nach A 6.2.6., wenn nur die eigentlichen Schwingungen erfaßt werden.

A 6.2.8. Berechnen Sie für das Naphthalinmolekül die Spur der Symmetrieoperationen bezüglich der Translation.

A 6.2.9. Das $CO_2$-Molekül ist linear und hat daher nur zwei Freiheitsgrade der Rotation. Bestimmen Sie für diese die Spuren der Symmetrieoperationen $\mathbf{1}$, $C_\infty(\varphi)$, $\sigma_h$, $i$.

A 6.2.10. Das $H_2O$-Molekül gehört der Symmetriegruppe $C_{2v}$ an. Definieren Sie den Vektorraum $V$ der Schwingungen dieser Punktgruppe.

## 6.3. Gruppentheorie molekularer Schwingungen

### E Einführung

*Klassen einer Gruppe*

Zwei Elemente $a$ und $b$ einer Gruppe $G$ heißen **zueinander konjugiert**, wenn es in $G$ wenigstens ein Element $\sigma$ mit der Eigenschaft

$$a = \sigma \cdot b \cdot \sigma^{-1} \tag{1}$$

gibt. Da mit $\sigma$ auch $\sigma^{-1}$ der Gruppe $G$ angehört, kann (1) auch in der Form

$$a = \sigma'^{-1} \cdot b \cdot \sigma' \qquad (\sigma' = \sigma^{-1}) \tag{1a}$$

geschrieben werden. Es besteht die Beziehung

$$a = e \cdot a \cdot e^{-1}. \tag{2}$$

Daher ist jedes Element zu sich selbst konjugiert.
Ist $a$ zu $b$, $b$ zu $c$ konjugiert, so gibt es Elemente $\sigma$, $\tau$ in $G$, für die

$$a = \sigma \cdot b \cdot \sigma^{-1}, \qquad b = \tau \cdot c \cdot \tau^{-1} \tag{3}$$

gilt, woraus

$$a = \sigma \cdot \tau \cdot c \cdot \tau^{-1} \cdot \sigma^{-1} = (\sigma \cdot \tau) \cdot c \cdot (\sigma \cdot \tau)^{-1} \tag{4}$$

folgt. $a$ und $c$ sind damit ebenfalls zueinander konjugiert.

Eine Klasse $K$ enthält alle zueinander konjugierten Elemente einer Gruppe. Kein Element kann zwei Klassen angehören (vgl. A 6.3.3.). Die Summe der Elemente $\sigma_1, \sigma_2, \ldots, \sigma_k$ einer Klasse $K$ heißt **Klassensumme** $\varkappa$:

$$\varkappa = \sum_{i=1}^{k} \sigma_i. \tag{5}$$

**Beispiel 6.3.1. Klassen**

a) Das Einselement jeder Gruppe bildet eine Klasse für sich, da für jedes $\sigma$

$$\sigma \cdot e \cdot \sigma^{-1} = e$$

gilt. Die Klassensumme ist $\varkappa = e$.

b) Jedes Element im Zentrum einer Gruppe $G$ bildet eine Klasse für sich. Die Elemente $\sigma_Z$ im Zentrum sind mit jedem Element $\sigma$ der Gruppe vertauschbar:

$$\sigma_Z \cdot \sigma = \sigma \cdot \sigma_Z.$$

Daher folgt durch Multiplikation von rechts mit $\sigma^{-1}$ stets

$$\sigma_Z = \sigma \cdot \sigma_Z \cdot \sigma^{-1}.$$

c) Die Punktgruppe $C_{3v}$, die aus sechs Elementen besteht, setzt sich aus drei Klassen zusammen (vgl. 6.3.1):

$$\{\mathbf{1}\}, \{\boldsymbol{C}_3, \boldsymbol{C}_3^2\}, \{\boldsymbol{\sigma}_v, \boldsymbol{\sigma}_v', \boldsymbol{\sigma}_v''\}.$$

Die Klassensummen sind

$$\varkappa_1 = \mathbf{1},\ \varkappa_2 = \boldsymbol{C} = \boldsymbol{C}_3 + \boldsymbol{C}_3^2,\ \varkappa_3 = \boldsymbol{\sigma} = \boldsymbol{\sigma}_v + \boldsymbol{\sigma}_v' + \boldsymbol{\sigma}_v''.$$

Die Charaktere konjugierter Elemente stimmen, bezogen auf die gleiche Normalschwingung, überein (vgl. A 6.3.5.). Alle Symmetrieoperationen einer Klasse haben daher bezüglich einer vorgegebenen Normalschwingung denselben Charakter.

*Lineare Kombination der Symmetrieoperationen*

Als Element $\xi$ der Gruppenalgebra wird die lineare Kombination der Symmetrieoperationen

$$\xi = \sum_j n_j \sigma_j \tag{6}$$

definiert. Darin erstreckt sich das Summenzeichen über sämtliche Symmetrieoperationen der Symmetriegruppe $G$. Die Koeffizienten $n_j$ sind reelle Zahlen. Zum Beispiel stellen die Klassensummen $\varkappa_i$ spezielle Elemente der Gruppenalgebra dar. Die identische Operation $\mathbf{1}$ der Symmetriegruppe ist mit dem Element $\xi = \mathbf{1}$ der Gruppenalgebra $\bar{G}$ identisch.

Zwei Elemente

$$\xi_i = \sum_j n_{ij} \sigma_j \qquad (i = 1, 2)$$

werden in der Gruppenalgebra nach den Gesetzen

$$\xi_1 + \xi_2 = \sum_j (n_{1j} + n_{2j})\,\sigma_j, \tag{7}$$

$$\xi_1 \cdot \xi_2 = \sum_j \sum_k n_{1j} n_{2k}\,\sigma_j \cdot \sigma_k \tag{8}$$

miteinander addiert bzw. multipliziert.

**Beispiel 6.3.2. Multiplikation zweier Elemente der $C_i$-Gruppe**

Es sei

$$\xi_i = n_i(\mathbf{1})\,\mathbf{1} + n_i(\boldsymbol{i})\,\boldsymbol{i}$$

mit $n_1(\mathbf{1}) = 2$, $n_1(\boldsymbol{i}) = 4$, $n_2(\mathbf{1}) = -2$, $n_2(\boldsymbol{i}) = 3$.
Dann ist

$$\xi_1 + \xi_2 = 7\boldsymbol{i}$$

und wegen $\mathbf{1} \cdot \mathbf{1} = \mathbf{1}$, $\mathbf{1} \cdot \boldsymbol{i} = \boldsymbol{i} \cdot \mathbf{1} = \boldsymbol{i}$, $\boldsymbol{i} \cdot \boldsymbol{i} = \mathbf{1}$

$$\xi_1 \cdot \xi_2 = (2 \cdot \mathbf{1} + 4\boldsymbol{i})\,(-2 \cdot \mathbf{1} + 3\boldsymbol{i}) = 8 \cdot \mathbf{1} + 4\boldsymbol{i}.$$

Als **Zentrum der Gruppenalgebra** definiert man die Menge aller Elemente $\xi_Z$, die mit jedem Element $\xi$ vertauschbar ist, für die also

$$\xi_Z \cdot \xi = \xi \cdot \xi_Z \tag{9}$$

gilt. Elemente im Zentrum einer Gruppe $G$ sind stets auch Elemente des Zentrums der Gruppenalgebra.
Es gelten die folgenden Sätze:

1. Jede Klassensumme $\varkappa$ liegt im Zentrum der Gruppenalgebra:

$$\varkappa \cdot \xi = \xi \cdot \varkappa \tag{10}$$

(vgl. A 6.3.7.).

2. Die Klassensummen bilden ein Fundamentalsystem zur Darstellung jedes Elementes $\xi_Z$ im Zentrum der Gruppenalgebra:

$$\xi_Z = \sum_{j=1}^{r} n_j \varkappa_j \tag{11}$$

(vgl. A 6.3.8.). Die Anzahl $r$ der Klassen wird als **Dimension des Zentrums** bezeichnet.

*Idempotente des Zentrums der Gruppenalgebra*

Ein von Null verschiedenes Element $\xi = \pi$ der Gruppenalgebra heißt idempotent, wenn

$$\pi^2 = \pi \tag{12}$$

gilt. Zwei Idempotente $\pi_i$ und $\pi_j$ sind zueinander orthogonal, wenn

$$\pi_i \cdot \pi_j = 0 \tag{13}$$

erfüllt ist.

Für die Normalschwingungen einer Punktgruppe sind die Idempotente im Zentrum der Gruppenalgebra von Interesse, bei denen die Beziehung

$$\pi_Z \cdot \xi = \xi \cdot \pi_Z \tag{14}$$

besteht. Aus der mathematischen Theorie folgt:

Im Zentrum der Gruppenalgebra existiert genau ein vollständiges System $S$ nicht weiter zerlegbarer, orthogonaler Idempotente mit der Eigenschaft

$$\sum_{i=1}^{l} \pi_i = \mathbf{1}, \tag{15}$$

für die jedes Idempotent $\pi_Z$ des Zentrums sich als Summe von Idempotenten dieses vollständigen Systems $S$ darstellen läßt (vgl. A 6.3.11. bis A 6.3.15.).

**Beispiel 6.3.3. Basissystem orthogonaler Idempotente des Zentrums der Gruppe $C_s$**

In $C_s$ bilden $\mathbf{1}$ und $\sigma$ je eine Klasse für sich und sind zugleich Klassensummen. Sie liegen im Zentrum, das die Dimension $r = 2$ hat. Die Elemente der Gruppenalgebra $G$ sind

$$\xi = n_1\mathbf{1} + n_2\sigma.$$

Für die Idempotente muß gelten

$$(n_1\mathbf{1} + n_2\sigma)^2 = n_1\mathbf{1} + n_2\sigma.$$

Wegen

$$\mathbf{1} \cdot \mathbf{1} = \mathbf{1}, \quad \mathbf{1} \cdot \sigma = \sigma \cdot \mathbf{1} = \sigma, \quad \sigma \cdot \sigma = \mathbf{1}$$

folgt

$$(n_1^2 + n_2^2)\,\mathbf{1} + 2n_1n_2\sigma = n_1\mathbf{1} + n_2\sigma,$$

$$n_1^2 + n_2^2 = n_1, \quad 2n_1n_2 = n_2.$$

Lösungen sind (das Nullelement wird ausgeschlossen)

$$n_1 = 1, \quad n_2 = 0: \qquad \pi_0 = \mathbf{1},$$

$$n_1 = \frac{1}{2}, \quad n_2 = \frac{1}{2}: \qquad \pi_1 = \frac{1}{2}\mathbf{1} + \frac{1}{2}\sigma,$$

$$n_1 = \frac{1}{2}, \quad n_2 = -\frac{1}{2}: \qquad \pi_2 = \frac{1}{2}\mathbf{1} - \frac{1}{2}\sigma.$$

Daraus erhält man

$$\pi_1 \cdot \pi_2 = 0,$$

ferner

$$\pi_1 + \pi_2 = \mathbf{1}.$$

$\pi_1$ und $\pi_2$ sind daher orthogonale Idempotente des Zentrums mit der Summe $\mathbf{1}$.

*Charaktertafeln der Symmetriegruppen*

Jedes Idempotent $\pi_i$ des Basissystems $S$ repräsentiert eine Symmetrierasse bzw. Normalschwingung $A'$, $A''$, $B'$, ..., $E$, ...der Gruppe. Das Basissystem orthogonaler

Idempotente $\pi_i$ ist für jede Symmetriegruppe als Linearkombinationen der Klassensummen $\varkappa_j$ tabelliert (vgl. Tab. 6.3.1). Diese Tabellen heißen **Charaktertafeln.**
Es sei $h$ die Ordnung der Symmetriegruppe, d. h. die Anzahl ihrer Symmetrieelemente $\sigma$. $\chi(\sigma_{ji}) = \chi_i(\sigma_j)$ gebe den Charakter der Symmetrieoperation $\sigma_j$ auf die $i$-te Symmetrierasse bzw. Normalschwingung an. Dann ist

$$\boxed{\pi_i = \frac{\chi_i(1)}{h} \sum_{j=1}^{r} \chi_i(\sigma_j^{-1})\, \varkappa_j}\,. \tag{16}$$

Das Summenzeichen erstreckt sich über sämtliche Klassen $K$. In den Charaktertafeln stehen in der linken Spalte die Symmetrierassen. Die obere Zeile enthält die Klassen. Jede Klasse ist durch ein Symmetrieelement gekennzeichnet. Der vorgestellte Zahlenfaktor (außer 1) gibt die Anzahl der zugehörigen Symmetrieelemente an. Die Charaktere $\chi_i(\sigma_j^{-1})$ sind in der durch Normalschwingung und Klasse bestimmten Zeile und Spalte eingetragen.

**Beispiel 6.3.4. Charaktertafel der Symmetriegruppe $C_s$**

$C_s$ hat die Ordnung $h = 2$ und folgende Charaktertafel (vgl. Tab. 6.3.1):

| $C_s$ | $1$ | $\sigma$ |
|---|---|---|
| $A'$ bzw. $\pi_1$ | 1 | 1 |
| $A''$ bzw. $\pi_2$ | 1 | −1 |

Die Klassensummen sind $1$ und $\sigma$. Jede Klasse enthält nur ein Element. Eins wird als Zahlenfaktor nicht vorangestellt. Für das Basissystem der orthogonalen Idempotente des Zentrums erhält man damit nach (16)

$$\pi_1 = \frac{1}{2}(1 + \sigma), \qquad \pi_2 = \frac{1}{2}(1 - \sigma)$$

in Übereinstimmung mit Beispiel 6.3.3.

Auf Grund von (16) lassen sich die Charaktere einer Normalschwingung durch Berechnung des Fundamentalsystems der orthogonalen Idempotente im Zentrum der Gruppenalgebra bestimmen (vgl. 6.3.2.) bzw. direkt aus den Charaktertafeln entnehmen.

*Irreduzible Zerlegung des G-Vektorraumes*

Eine Teilmenge $U$ des $3N$-dimensionalen Vektorraumes $V$ heißt Unterraum von $V$, wenn die lineare Verknüpfung zweier Vektoren aus $U$ wieder einen Vektor aus $U$ ergibt. Die Dimension von $U$ kann dabei niedriger sein als die von $V$. Das ist z. B. dann der Fall, wenn die Schwingungen in $U$ durch eine Teilmenge $k$ der insgesamt $3N$ veränderlichen Koordinaten dargestellt wird. Daher bilden die Schwingungen eines Teiles der $N$ Punkte einer Punktgruppe stets eine Untergruppe der vollständigen Schwingung.
Ein Unterraum $U$ wird als **$G$-invariant** bezeichnet, wenn für alle Symmetrieoperationen $\sigma$ der Gruppe und alle Vektoren $X$ aus $U$ der Vektor $\sigma \cdot X$ ebenfalls in $U$ liegt.

Ist für einen Vektor $\boldsymbol{X}$

$$\pi_i \cdot \boldsymbol{X} = \boldsymbol{X} \tag{17}$$

erfüllt, so heißt $\boldsymbol{X}$ vom $i$-ten Symmetrietyp bzw. der $i$-ten Symmetrierasse zugehörig. Die Menge aller Vektoren $\boldsymbol{X}_i$ der $i$-ten Symmetrierasse bilden einen $G$-invarianten Unterraum $U_i$ des Vektorraumes $V$ (vgl. A 6.3.23.). Definieren $\boldsymbol{b}_1, \boldsymbol{b}_2, \ldots \boldsymbol{b}_n$ eine Basis des Vektorraumes $V$, dann spannen die Vektoren

$$\boxed{\pi_i \cdot \boldsymbol{b}_1, \ \pi_i \cdot \boldsymbol{b}_2, \ldots, \pi_i \cdot \boldsymbol{b}_n} \tag{18}$$

den Unterraum $U_i$ auf (vgl. A 6.3.24.).
Ein Vektorraum $U$, der sich nicht weiter in $G$-invariante Unterräume zerlegen läßt, heißt **irreduzibel**. Der irreduzible $G$-Vektorraum besteht nur aus Vektoren einer Symmetrierasse $\pi_i$. Jedem irreduziblen $G$-Vektorraum ist daher eine Schwingungsrasse zugeordnet. Die Schwingungsrassen bzw. irreduziblen Matrizendarstellungen der Gruppe nach (6.2./14) entsprechen genau den irreduziblen $G$-Vektorräumen.
Jeder Schwingungsvektor $\boldsymbol{X}$ aus $V$ läßt sich eindeutig als Summe

$$\boldsymbol{X} = \sum_i \boldsymbol{X}_i \tag{19}$$

von Vektoren $\boldsymbol{X}_i$ der irreduziblen $G$-invarianten Unterräume darstellen (vgl. 6.3.3.).
Die Anzahl $n_i$ der Dimensionen eines $G$-invarianten Unterraumes $U_i$ ergibt sich als Produkt der Entartung $g = \chi_i(1)$ bzw. der Anzahl der Dimensionen des $i$-ten Charak-

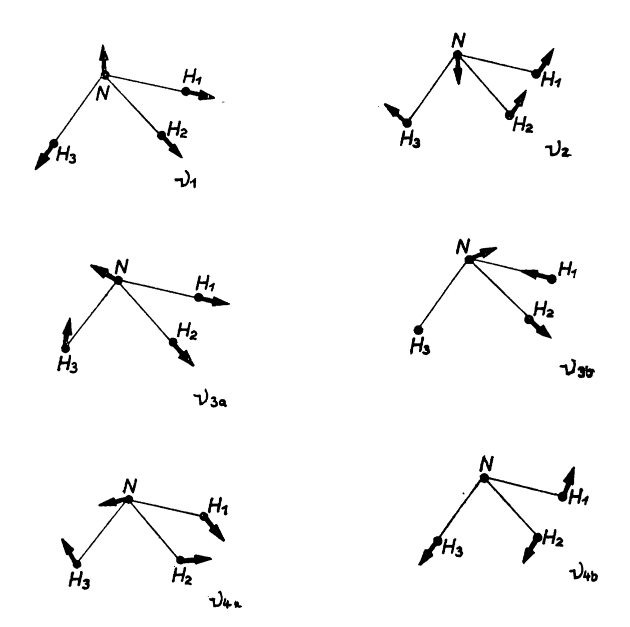



Bild 6.3.1. Symmetrierassen des $NH_3$-Moleküls

ters und der Anzahl $N_i$ gleicher Matrizen $\sigma_{ij}$ in der reduziblen Matrix $\sigma_j$ nach (6.2./14):

$$n_i = \chi_i(1)\, N_i. \qquad (20)$$

Jede der $N_i$ Matrizen $\sigma_{ji}$ bezieht sich entsprechend ihrer Stellung in der reduziblen Matrix $\sigma_j$ auf andere Koordinaten. Die $N_i$ gleichen Matrizen $\sigma_{ji}$ kennzeichnen daher $N_i$ verschiedene Normalschwingungen des Punktsystems, die jedoch alle der gleichen Symmetrierasse, z. B. $A'$, angehören. Diese Normalschwingungen erfolgen mit verschiedenen Frequenzen, die der Messung zugänglich sind (vgl. 6.3.3. sowie Bild 6.3.1).



**Probleme**

## 6.3.1. Klasseneinteilung der $C_{3v}$-Gruppe

Teilen Sie die Symmetrieelemente der Gruppe $C_{3v}$ in Klassen ein.

**Lösung:**

Zu einem herausgegriffenen Element bestimmen wir nacheinander alle Elemente, die mit diesem konjugiert sind. Sie bilden die Klassen $K_1$. Sind in vorhandenen Klassen $K_1, \ldots$ noch nicht alle Elemente der Gruppe $G$ enthalten, so wird aus den verbliebenen ein beliebiges herausgegriffen und in gleicher Weise verfahren.
Die $C_{3v}$-Gruppe setzt sich nach Tab. 6.1.1 aus den Operationen

$$\mathbf{1},\ \boldsymbol{C}_3,\ \boldsymbol{C}_3^2,\ \boldsymbol{\sigma}_v,\ \boldsymbol{\sigma}_v',\ \boldsymbol{\sigma}_v'' \qquad (1)$$

zusammen. **1** bildet eine Klasse für sich.
Nach der Gruppentafel Tab. 6.1.1 ergibt bei der $C_{3v}$-Gruppe die Aufeinanderfolge einer Drehung und einer Spiegelung unabhängig von der Reihenfolge stets eine Spiegelung, während zwei Spiegelungen nacheinander eine Drehung oder **1** ergeben. Ferner sind die Spiegelungen zu sich selbst invers. Bei den Drehungen gilt

$$\boldsymbol{C}_3^{-1} = \boldsymbol{C}_3^2, \qquad (\boldsymbol{C}_3^2)^{-1} = \boldsymbol{C}_3. \qquad (2)$$

Damit erhalten wir für die adjungierten Elemente der Spiegelungen wiederum Spiegelungen:

$$\text{Drehung} \cdot \text{Spiegelung} \cdot \text{Drehung} = \text{Spiegelung} \qquad (3)$$

$$\text{Spiegelung} \cdot \text{Spiegelung} \cdot \text{Spiegelung} = \text{Spiegelung}. \qquad (4)$$

Auf Grund dessen bilden die Spiegelungen eine Klasse für sich, und zwar wegen

$$\boldsymbol{\sigma}_v \cdot \boldsymbol{\sigma}_v' \cdot \boldsymbol{\sigma}_v^{-1} = \boldsymbol{C}_3 \cdot \boldsymbol{\sigma}_v = \boldsymbol{\sigma}_v'', \qquad (5)$$
$$\ldots$$

gemeinsam eine Klasse.
Aus Tab. 6.1.1 entnimmt man ferner

$$\boldsymbol{\sigma}_v \cdot \boldsymbol{C}_3 \cdot \boldsymbol{\sigma}_v^{-1} = \boldsymbol{\sigma}_v' \cdot \boldsymbol{\sigma}_v = \boldsymbol{C}_3^2, \qquad \boldsymbol{\sigma}_v \cdot \boldsymbol{C}_3^2 \cdot \boldsymbol{\sigma}_v^{-1} = \boldsymbol{\sigma}_v'' \cdot \boldsymbol{\sigma}_v = \boldsymbol{C}_3. \qquad (6)$$

Daher bilden auch $\boldsymbol{C}_3$ und $\boldsymbol{C}_3^2$ gemeinsam eine Klasse.

### 6.3.2. Idempotente des Zentrums der $C_{3v}$-Gruppe

Stellen Sie das Basissystem orthogonaler Idempotente des Zentrums der Gruppe $C_{3v}$ als Linearkombinationen der Klassensummen dar. Kennzeichnen Sie danach die Symmetrierassen und stellen Sie die Charaktertafel auf.

**Lösung:**

Wir verwenden die Bezeichnungen nach Beispiel 6.3.2. Die Idempotente des Zentrums schreiben wir in der Form

$$\boldsymbol{\pi}_i = n_{i1}\mathbf{1} + n_{i2}\boldsymbol{C} + n_{i3}\boldsymbol{\sigma} \tag{1}$$

mit

$$\boldsymbol{C} = \boldsymbol{C}_3 + \boldsymbol{C}_3{}^2, \qquad \boldsymbol{\sigma} = \boldsymbol{\sigma}_{\text{v}} + \boldsymbol{\sigma}_{\text{v}}' + \boldsymbol{\sigma}_{\text{v}}''. \tag{1a}$$

Nach der Gruppentafel Tab. 6.1.1 folgt

$$\mathbf{1}\cdot\mathbf{1} = \mathbf{1}, \quad \mathbf{1}\cdot\boldsymbol{C} = \boldsymbol{C} = \mathbf{1}\cdot\boldsymbol{\sigma} = \boldsymbol{\sigma}, \tag{2}$$

$$\boldsymbol{C}\cdot\mathbf{1} = \boldsymbol{C}, \quad \boldsymbol{C}\cdot\boldsymbol{C} = (\boldsymbol{C}_3 + \boldsymbol{C}_3{}^2)^2 = 2\cdot\mathbf{1} + \boldsymbol{C}, \quad \boldsymbol{C}\cdot\boldsymbol{\sigma} = 2\boldsymbol{\sigma}, \tag{3}$$

$$\boldsymbol{\sigma}\cdot\mathbf{1} = \boldsymbol{\sigma}, \quad \boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{C} = 2\boldsymbol{\sigma}, \quad \boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{\sigma} = 3(\mathbf{1} + \boldsymbol{C}). \tag{4}$$

Ausmultiplizieren von $\boldsymbol{\pi}_i^2$ ergibt

$$(x_{i1}\mathbf{1} + x_{i2}\boldsymbol{C}_2 + x_{i3}\boldsymbol{\sigma})^2 = (x_{i1}^2 + 2x_{i2}^2 + 3x_{i3})^2\,\mathbf{1} + (2x_{i1}x_{i2} + x_{i2}^2 + 3x_{i3}^2)\,\boldsymbol{C} + (2x_{i1}x_{i3} + 4x_{i2}x_{i3})\,\boldsymbol{\sigma}. \tag{5}$$

Die Forderung $\boldsymbol{\pi}_i^2 = \boldsymbol{\pi}_i$ nach (6.3./12) bedeutet

$$\left.\begin{aligned} x_{i1}^2 + 2x_{i2}^2 + 3x_{i3}^2 &= x_{i1}, \\ 2x_{i1}x_{i2} + x_{i2}^2 + 3x_{i3}^2 &= x_{i2}, \\ 2x_{i1}x_{i3} + 4x_{i2}x_{i3} &= x_{i3}. \end{aligned}\right\} \tag{6}$$

In gleicher Weise folgt aus der Forderung (6.3./13)

$$\left.\begin{aligned} x_{i1}x_{j1} + 2x_{i2}x_{j2} + 3x_{i3}x_{j3} &= 0, \\ x_{i1}x_{j2} + x_{i2}x_{j1} + x_{i2}x_{j2} + 3x_{i3}x_{j3} &= 0, \\ x_{i1}x_{j3} + 2x_{i2}x_{j3} + 2x_{i3}x_{j2} + x_{i3}x_{j1} &= 0. \end{aligned}\right\} \tag{7}$$

Als einziges Lösungssystem, das sämtliche Forderungen nach (6) und (7) befriedigt, erhält man bis auf Vertauschungen der Lösungsvektoren $x_{i1}$, $x_{i2}$, $x_{i3}$ untereinander

$$\left.\begin{aligned} &x_{11} = \frac{1}{6}, \quad x_{12} = \frac{1}{6}, \quad x_{13} = \frac{1}{6}, \\ &x_{21} = \frac{1}{6}, \quad x_{22} = \frac{1}{6}, \quad x_{23} = -\frac{1}{6}, \\ &x_{31} = \frac{2}{3}, \quad x_{32} = -\frac{1}{3}, \quad x_{33} = 0. \end{aligned}\right\} \tag{8}$$

Es ergeben sich somit die orthogonalen Idempotente des Zentrums

$$\pi_1 = \frac{1}{6}(1 + C + \sigma), \qquad \pi_2 = \frac{1}{6}(1 + C - \sigma), \qquad \pi_3 = \frac{2}{3}1 - \frac{1}{3}C. \tag{9}$$

$\pi_1$ und $\pi_2$ stellen wegen $\chi_{1,2}(1) = 1$ eindimensionale Schwingungen dar. Dagegen ist $\pi_3$ wegen $\chi_3(1) = 2$ zweidimensional. Wegen $\chi_{1,2}(C) = 1$ sind $\pi_1$ und $\pi_2$ symmetrisch. Da weder $i$ noch $\sigma_h$ als Symmetrieelemente auftreten, entfällt die weitere Kennzeichnung. $\pi_3$ stellt die Symmetrierasse $E$ dar. Die Symmetrietafel lautet somit

| $C_{3v}$ | $1$ | $2C$ | $3\sigma_v$ |
|---|---|---|---|
| $A_1$ | 1 | 1 | 1 |
| $A_2$ | 1 | 1 | −1 |
| $E$ | 2 | −1 | 0 |

### 6.3.3. Anzahl gleichartiger Normalschwingungen und Anzahl der Dimensionen eines $G$-invarianten Unterraumes

Die Charaktere der Symmetrieoperationen genügen nach A 6.3.22. der Orthogonalitäts- und Normierungsbedingung

$$\frac{1}{h}\sum_{j=1}^{r} \varrho_j \chi(\sigma_{jk})\, \chi(\sigma_{jl}^{-1}) = \delta_{kl} \tag{1}$$

($\varrho_j$ Anzahl der Elemente der $j$-ten Klasse). Leiten Sie daraus eine Formel für die Anzahl $N_i$ gleicher Matrizen $\sigma_{ji}$ in der irreduziblen Darstellung der Symmetrieoperationen ab. Bestimmen Sie die Anzahl $n_i$ der Dimensionen des $G$-invarianten Unterraumes $U_i$. Berechnen Sie die Anzahl der Normalschwingungen und die Anzahl der Dimensionen für jede Symmetrierasse des $NH_3$-Moleküls ($C_{3v}$).

**Lösung:**

Die vollständige Reduktion bei der Darstellung (6.2./14) einer Symmetrieoperation $\sigma_j$ durch irreduzible Matrizen $\sigma_{ji}$ wird vereinfachend in der Form

$$\sigma_j = N_1\sigma_{j1} + N_2\sigma_{j2} + \cdots + N_r\sigma_{jr} = \sum_{i=1}^{r} N_i\sigma_{ji} \tag{2}$$

dargestellt. Da nur Matrizen mit gleicher Anzahl von Zeilen und Spalten miteinander additiv verknüpft werden können, hat die Darstellung (2) nur symbolische Bedeutung, stellt jedoch keine Matrizengleichung dar. $N_i$ gibt an, wie oft die irreduzible Matrix $\sigma_{ji}$ in der reduziblen Darstellung $\sigma_j$ enthalten ist. Nach (2) ergibt sich für den Charakter der Symmetrieoperation

$$\chi(\sigma_j) = \sum_{i=1}^{r} N_i\chi(\sigma_{ji}). \tag{3}$$

Es bezeichne $\sigma_{jk}$ eine irreduzible Matrix der Darstellung (2). Durch Multiplikation mit $\chi(\sigma_{jk}^{-1})$ und Summierung über alle Symmetrieoperationen der Gruppe folgt

$$\sum_{j=1}^{h} \chi(\sigma_j)\, \chi(\sigma_{jk}^{-1}) = \sum_{j=1}^{r} \varrho_j\chi(\sigma_j)\, \chi(\sigma_{jk}^{-1}). \tag{4}$$

Hierin kann die Entwicklung nach (3) eingesetzt werden:

$$\sum_{j=1}^{r} \varrho_j \chi(\sigma_j)\, \chi(\sigma_{jk}^{-1}) = \sum_{j=1}^{r} \left[ \varrho_j \chi(\sigma_{jk}^{-1}) \sum_{j=1}^{r} N_i \chi(\sigma_{ji}) \right]. \tag{5}$$

Wegen der Orthogonalitätsbedingung (1) ist in (5) nur der Wert für $i = k$ von Interesse. Daher können wir

$$\sum_{j=1}^{r} \varrho_j \chi(\sigma_j)\, \chi(\sigma_{jk}^{-1}) = N_k \sum_{j=1}^{r} \varrho_j \chi(\sigma_{jk}^{-1})\, \chi(\sigma_{jk}) \tag{6}$$

schreiben. Auf Grund der Normierungsbedingung (1) ergibt sich hieraus

$$N_k = \frac{1}{h} \sum_{j=1}^{r} \varrho_j \chi(\sigma_{jk}^{-1})\, \chi(\sigma_j). \tag{7}$$

Die Anzahl $n_k$ der Dimensionen in der irreduziblen Darstellung folgt durch Multiplikation mit dem Entartungsgrad $g = \chi_k(1)$. Man erhält damit

$$\boxed{n_k = \frac{g}{h} \sum_{j=1}^{r} \varrho_j \chi(\sigma_{jk}^{-1})\, \chi(\sigma_j)}\,. \tag{8}$$

Bei der Berechnung der Werte für das $NH_3$-Molekül berücksichtigen wir $\chi(\mathbf{1}) = 12$, $\chi(C_3) = 0$, $\chi(\sigma_V) = 2$ nach 6.2.4. Aus der Charaktertafel ergibt sich damit

$$n_1 = n(A_1) = \frac{1}{6}[1 \cdot 1 \cdot 12 + 2 \cdot 1 \cdot 0 + 3 \cdot 1 \cdot 2] = 3,$$

$$n_2 = n(A_2) = \frac{1}{6}[1 \cdot 1 \cdot 12 + 2 \cdot 1 \cdot 0 + 3 \cdot (-1) \cdot 2] = 1,$$

$$n_3 = n(E) = \frac{2}{6}[1 \cdot 2 \cdot 12 + 2 \cdot (-1) \cdot 0 + 3 \cdot 0 \cdot 2] = 8.$$

Sollen nur die eigentlichen Schwingungen abgezählt, d. h. Rotation und Translation nicht erfaßt werden, so erhält man nach 6.2.5. $\chi'(\mathbf{1}) = 6$, $\chi'(C_3) = 0$, $\chi'(\sigma_V) = 2$ und daraus für die Anzahl der Dimensionen bei den einzelnen Rassen

$$n_1' = n'(A_1) = \frac{1}{6}[1 \cdot 1 \cdot 6 + 2 \cdot 1 \cdot 0 + 3 \cdot 1 \cdot 2] = 2,$$

$$n_2' = n'(A_2) = \frac{1}{6}[1 \cdot 1 \cdot 6 + 2 \cdot 1 \cdot 0 + 3 \cdot (-1) \cdot 2] = 0,$$

$$n_3' = n'(E) = \frac{2}{6}[1 \cdot 2 \cdot 6 + 2 \cdot (-1) \cdot 0 + 3 \cdot 0 \cdot 2] = 4.$$

Für die Anzahl der eigentlichen Schwingungen erhält man

$$N_1' = 2, \qquad N_2' = 0, \qquad N_3' = 2.$$

Entsprechend den 12 Freiheitsgraden des vieratomigen Moleküls liegen somit 12 Dimensionen der Schwingung vor. Davon sind sechs uneigentlich: bei der $A_1$- und der $A_2$-Rasse je eine, bei der $E$-Rasse vier. Bei der $A_1$-Rasse ergeben sich zwei Normalschwingungen, bei der $E$-Rasse ebenfalls zwei, bei der $A_2$-Rasse keine (vgl. Bild 6.3.1). Für die Translationen erhält man mit

$\chi_T(\mathbf{1}) = 3$, $\chi_T(C_3) = 0$, $\chi_T(\sigma_v) = 2$ nach 6.2.5.

$$n_{1T} = n_T(A_1) = \frac{1}{6}[1 \cdot 1 \cdot 3 + 2 \cdot 1 \cdot 0 + 3 \cdot 1 \cdot 1] = 1,$$

$$n_{2T} = n_T(A_2) = \frac{1}{6}[1 \cdot 1 \cdot 3 + 2 \cdot 1 \cdot 0 + 3 \cdot (-1) \cdot 1] = 0,$$

$$n_{3T} = n_T(E) = \frac{2}{6}[1 \cdot 2 \cdot 3 + 2 \cdot (-1) \cdot 0 + 3 \cdot 0 \cdot 1] = 2.$$

Ebenso folgt

$$n_{1R} = n_R(A_1) = 0, \qquad n_{2R} = n_R(A_2) = 1, \qquad n_{3R} = n_R(E) = 2.$$

Die $A_1$-Rasse enthält somit eine Dimension der Translation, jedoch keine Rotation, die $A_2$-Rasse eine Rotation, jedoch keine Translation, die $E$-Rasse zwei Dimensionen der Translation und zwei Dimensionen der Rotation.
Entsprechend dieser Untersuchungen sind Translationen und Rotationen in den Charaktertafeln gekennzeichnet.

### 6.3.4. Irreduzible Zerlegung des $V$-Raumes

Traubensäure hat die Struktur nach Bild 6.2.4. Das Molekül gehört der Gruppe $C_i$ an.
Zerlegen Sie den $G$-Raum der Symmetriegruppe $C_i$ in die $G$-invarianten Unterräume, wenn nur die Bewegung der beiden Atomkomplexe C—H—OH—COOH gegeneinander untersucht wird. Deuten Sie die Eigenschaften der $G$-invarianten Unterräume gegenüber den Symmetrieoperationen der Gruppe.
Stellen Sie den Schwingungszustand $\boldsymbol{X} = 2\boldsymbol{b}_1 + 4\boldsymbol{b}_4$ in $G$-invarianten Unterräumen dar.

**Lösung:**

Symmetrieelemente der Gruppe $C_i$ sind nach Charaktertafel 6.3.1 $\mathbf{1}$ und $\boldsymbol{i}$. Als Ordnung der Gruppe folgt $h = 2$. Jedes Symmetrieelement bildet eine Klasse für sich. Als Idempotente des Zentrums erhält man nach der Charaktertafel gemäß (6.3./14)

$$\pi_1 = \frac{1}{2}(\mathbf{1} + \boldsymbol{i}), \tag{1}$$

$$\pi_2 = \frac{1}{2}(\mathbf{1} - \boldsymbol{i}). \tag{2}$$

Die beiden Koordinatensysteme $\boldsymbol{b}_1, \boldsymbol{b}_2, \boldsymbol{b}_3$ und $\boldsymbol{b}_4, \boldsymbol{b}_5, \boldsymbol{b}_6$ seien in den Ruhepunkten der Schwerpunkte beider Komplexe errichtet. $\boldsymbol{b}_1$, $\boldsymbol{b}_4$ sowie $\boldsymbol{b}_2$, $\boldsymbol{b}_5$ und $\boldsymbol{b}_3$, $\boldsymbol{b}_6$ werden zueinander parallel orientiert. $\boldsymbol{b}_3$ habe die Richtung der Verbindungsgeraden zwischen beiden Ruhepunkten (vgl. Bild 6.2.5). $\boldsymbol{b}_1, \boldsymbol{b}_2, \boldsymbol{b}_3$ gehen durch $\boldsymbol{i}$ in $-\boldsymbol{b}_4, -\boldsymbol{b}_5, -\boldsymbol{b}_6$ über.
Zur Bestimmung der Basis des Unterraumes $U_1$ berechnet man nach (6.3./18)

$$\pi_1 \cdot \boldsymbol{b}_1 = \frac{1}{2}(\mathbf{1} + \boldsymbol{i}) \cdot \boldsymbol{b}_1 = \frac{1}{2}(\boldsymbol{b}_1 - \boldsymbol{b}_4). \tag{3}$$

Bis auf das Vorzeichen liefert $\pi_1 \cdot \boldsymbol{b}_4$ denselben Vektor wie $\pi_1 \cdot \boldsymbol{b}_1$:

$$\pi_1 \cdot \boldsymbol{b}_4 = \frac{1}{2}(\mathbf{1} + \boldsymbol{i}) \cdot \boldsymbol{b}_4 = -\frac{1}{2}(\boldsymbol{b}_1 - \boldsymbol{b}_4). \tag{4}$$

In gleicher Weise folgt

$$\pi_1 \cdot \boldsymbol{b}_2 = -\pi_1 \cdot \boldsymbol{b}_5 = \frac{1}{2}(\boldsymbol{b}_2 - \boldsymbol{b}_5), \tag{5}$$

$$\pi_1 \cdot \boldsymbol{b}_3 = -\pi_1 \cdot \boldsymbol{b}_6 = \frac{1}{2}(\boldsymbol{b}_3 - \boldsymbol{b}_6). \tag{6}$$

Der Unterraum $U_1$ wird daher durch die drei Vektoren

$$\frac{1}{2}(\boldsymbol{b}_1 - \boldsymbol{b}_4), \quad \frac{1}{2}(\boldsymbol{b}_2 - \boldsymbol{b}_5), \quad \frac{1}{2}(\boldsymbol{b}_3 - \boldsymbol{b}_6) \tag{7}$$

aufgespannt. Seine Dimension ist $n_1 = 3$ (in Übereinstimmung mit der Rechnung nach 6.3.3.). Ebenso erhält man

$$\pi_2 \cdot \boldsymbol{b}_1 = \pi_2 \cdot \boldsymbol{b}_4 = \frac{1}{2}(\boldsymbol{b}_1 + \boldsymbol{b}_4), \tag{8}$$

$$\pi_2 \cdot \boldsymbol{b}_2 = \pi_2 \cdot \boldsymbol{b}_5 = \frac{1}{2}(\boldsymbol{b}_2 + \boldsymbol{b}_5), \tag{9}$$

$$\pi_2 \cdot \boldsymbol{b}_3 = \pi_2 \cdot \boldsymbol{b}_6 = \frac{1}{2}(\boldsymbol{b}_3 + \boldsymbol{b}_6). \tag{10}$$

Daher ergibt sich

$$\frac{1}{2}(\boldsymbol{b}_1 + \boldsymbol{b}_4), \quad \frac{1}{2}(\boldsymbol{b}_2 + \boldsymbol{b}_5), \quad \frac{1}{2}(\boldsymbol{b}_3 + \boldsymbol{b}_6) \tag{11}$$

als Basis des Vektorraumes $U_2$. Auch er hat die Dimension 3. Das Basissystem des Vektorraumes $U_1$ bleibt sowohl bei Anwendung der Symmetrieoperation **1** als auch der Symmetrieoperation $\boldsymbol{i}$ ungeändert. $U_1$ enthält daher alle Schwingungsvektoren $\boldsymbol{X}$, die sich gegenüber **1** und $\boldsymbol{i}$ symmetrisch verhalten.
Im Basissystem $U_2$ läßt $\boldsymbol{i}$ die Basisvektoren unverändert, $\boldsymbol{i}$ kehrt ihre Orientierung um:

$$\boldsymbol{i} \cdot \frac{1}{2}(\boldsymbol{b}_1 + \boldsymbol{b}_4) = -\frac{1}{2}(\boldsymbol{b}_1 + \boldsymbol{b}_4), \ldots .$$

$U_2$ enthält daher alle Schwingungsvektoren $\boldsymbol{X}$, die sich gegenüber $\boldsymbol{i}$ antimetrisch verhalten.
Ein Auslenkungszustand der $C_i$-Gruppe läßt sich gemäß

$$\left.\begin{array}{lll} \frac{1}{2}C_{11}(\boldsymbol{b}_1 - \boldsymbol{b}_4), & \frac{1}{2}C_{12}(\boldsymbol{b}_2 - \boldsymbol{b}_5), & \frac{1}{2}C_{13}(\boldsymbol{b}_3 - \boldsymbol{b}_6); \\ \frac{1}{2}C_{21}(\boldsymbol{b}_1 + \boldsymbol{b}_4), & \frac{1}{2}C_{22}(\boldsymbol{b}_2 + \boldsymbol{b}_5), & \frac{1}{2}C_{23}(\boldsymbol{b}_3 + \boldsymbol{b}_6) \end{array}\right\} \tag{12}$$

durch sechs Maßzahlen $c_{ij}$ ($i = 1, 2$; $j = 1, 2, 3$) darstellen.
Im vorliegenden Fall muß

$$\frac{1}{2}C_{11} + \frac{1}{2}C_{21} = 2, \qquad -\frac{1}{2}C_{11} + \frac{1}{2}C_{21} = 4$$

sein, woraus

$$C_{11} = -2, \qquad C_{21} = 6$$

folgt. Die übrigen Koeffizienten verschwinden.

### 6.3.5. Translationen und Rotationen der Symmetriegruppe $C_i$

Berechnen Sie die Anzahl der Schwingungen, der Translationen und der Rotationen für die Symmetrierassen der Gruppe $C_i$, bezogen auf einen Körper aus zwei starren Komplexen nach 6.3.4. Stellen Sie die Bewegungsvorgänge in den $G$-invarianten Unterräumen dar. Bestimmen Sie die Schwingungszahlen für das Traubensäuremolekül, wenn seine sämtlichen Atome beweglich sind.

**Lösung:**

Der symmetrische Körper aus zwei starren Komplexen, die jeder durch einen Massenpunkt idealisiert werden, stellt in dieser Form ein lineares Molekül dar. Nach 6.2.4. erhält man für dieses

$$\chi(\mathbf{1}) = 2 \cdot 3 = 6, \qquad \chi(\boldsymbol{i}) = 0. \tag{1}$$

Wird nur die Translation allein untersucht , so folgt nach 6.2.5.

$$\chi_{\mathrm{T}}(\mathbf{1}) = 3, \qquad \chi_{\mathrm{T}}(\boldsymbol{i}) = -3, \tag{2}$$

da auch das lineare Molekül drei Freiheitsgrade der Translation besitzt. Dagegen kommen dem linearen Molekül nur zwei Freiheitsgrade der Rotation zu. Für die Symmetriegruppe $C_i$ erhält man nach 3.1.

$$\mathbf{1}_{(2)} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}, \qquad \boldsymbol{i}_{(2)} = \begin{pmatrix} -1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \tag{3}$$

und damit nach 6.2.5.

$$\chi_{\mathrm{R}(2)}(\mathbf{1}) = 2, \qquad \chi_{\mathrm{R}(2)}(\boldsymbol{i}) = (-1)\, sp\,\boldsymbol{i}_{(2)} = +2. \tag{4}$$

Als Gesamtanzahl der eigentlichen und uneigentlichen Schwingungen ergibt sich daher nach 6.2.4. mittels (1)

$$n(A_g) = n_1 = \frac{1}{2}[1 \cdot 1 \cdot 6 + 1 \cdot 1 \cdot 0] = 3, \tag{5}$$

$$n(A_u) = n_2 = \frac{1}{2}[1 \cdot 1 \cdot 6 + 1 \cdot (-1) \cdot 0] = 3. \tag{6}$$

Als Anzahl der hierin enthaltenen Translationen erhält man mittels (2)

$$n_{\mathrm{T}}(A_g) = \frac{1}{2}[1 \cdot 1 \cdot 3 + 1 \cdot 1 \cdot (-3)] = 0, \tag{7}$$

$$n_{\mathrm{T}}(A_u) = \frac{1}{2}[1 \cdot 1 \cdot 3 + 1 \cdot (-1) \cdot (-3)] = 3. \tag{8}$$

Die Symmetrierasse $A_u$ enthält keine eigentlichen Schwingungen. Ihre sämtlichen Bewegungsvorgänge sind Translationen.
Für die Anzahl der Rotationen folgt mittels (4)

$$n_{\mathrm{R}}(A_g) = \frac{1}{2}[1 \cdot 1 \cdot 2 + 1 \cdot 1 \cdot 2] = 2, \tag{9}$$

$$n_{\mathrm{R}}(A_u) = \frac{1}{2}[1 \cdot 1 \cdot 2 + 1 \cdot (-1) \cdot 2] = 0. \tag{10}$$

Die totalsymmetrische Schwingungsrasse $A_g$ enthält zwei Rotationen, dazu kommt eine eigentliche Schwingung.
Die Bewegungen der beiden Massenpunkte werden nach (6.3.4./7) für $A_g$ durch das Basissystem

$$\frac{1}{2}(\boldsymbol{b}_1 - \boldsymbol{b}_4), \quad \frac{1}{2}(\boldsymbol{b}_2 - \boldsymbol{b}_5), \quad \frac{1}{2}(\boldsymbol{b}_3 - \boldsymbol{b}_6) \tag{11}$$

beschrieben. Der Auslenkung

$$\boldsymbol{r}_1 = x_{11}\boldsymbol{b}_1 + x_{12}\boldsymbol{b}_2 + x_{13}\boldsymbol{b}_3 \tag{12}$$

des ersten Massenpunktes entspricht somit die Auslenkung

$$\boldsymbol{r}_2 = -x_{11}\boldsymbol{b}_1 - x_{12}\boldsymbol{b}_2 - x_{13}\boldsymbol{b}_3 \tag{13}$$

des zweiten. Bezeichnet $\boldsymbol{b}_3$ die Molekül- bzw. Hauptdrehachse, die allgemein als $z$-Achse festgelegt ist, so stellt

$$\boldsymbol{r}_{11} = x_{11}\boldsymbol{b}_1, \quad \boldsymbol{r}_{21} = -x_{11}\boldsymbol{b}_1 \quad \text{bzw.} \quad -x_{11}\boldsymbol{b}_4 \tag{14}$$

eine Drehung des Moleküls um die $\boldsymbol{b}_2$- bzw. $y$-Achse, dagegen

$$\boldsymbol{r}_{12} = x_{12}\boldsymbol{b}_2, \quad \boldsymbol{r}_{22} = -x_{12}\boldsymbol{b}_2 \quad \text{bzw.} \quad -x_{12}\boldsymbol{b}_5 \tag{15}$$

eine Drehung um die $\boldsymbol{b}_1$- bzw. $x$-Achse dar. $A_g$ charakterisiert somit in zwei von drei Dimensionen die Rotationen $R_x$ und $R_y$ (vgl. Charaktertafel Tab. 6.3.1).
Die Auslenkung

$$\boldsymbol{r}_{13} = x_{13}\boldsymbol{b}_3, \quad \boldsymbol{r}_{23} = -x_{13}\boldsymbol{b}_3 \quad \text{bzw.} \quad -x_{13}\boldsymbol{b}_6 \tag{16}$$

auf der Hauptdrehachse stellt dagegen für $x_{13} = x_{13}(t)$ eine eigentliche Schwingung dar, bei der der Abstand der Massenpunkte geändert wird (vgl. Bild 6.3.2).

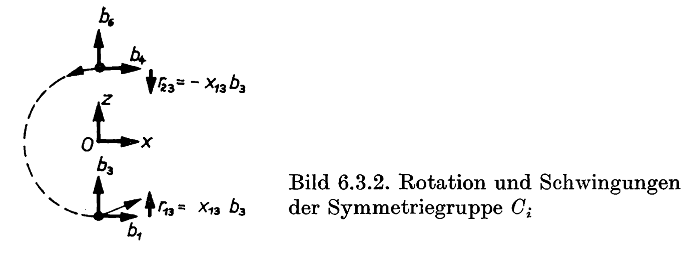


Bild 6.3.2. Rotation und Schwingungen der Symmetriegruppe $C_i$

Für die Symmetrierasse $A_u$ ergibt sich nach (6.3.4./11) der $G$-invariante Unterraum

$$\frac{1}{2}(\boldsymbol{b}_1 + \boldsymbol{b}_4), \quad \frac{1}{2}(\boldsymbol{b}_2 + \boldsymbol{b}_5), \quad \frac{1}{2}(\boldsymbol{b}_3 + \boldsymbol{b}_6), \tag{17}$$

d. h., der Auslenkung

$$\bar{\boldsymbol{r}}_1 = \bar{x}_{11}\boldsymbol{b}_1 + \bar{x}_{12}\boldsymbol{b}_2 + \bar{x}_{13}\boldsymbol{b}_3 \tag{18}$$

des ersten Massenpunktes entspricht die gleiche Auslenkung

$$\bar{\boldsymbol{r}}_2 = \bar{x}_{11}\boldsymbol{b}_1 + \bar{x}_{12}\boldsymbol{b}_2 + \bar{x}_{13}\boldsymbol{b}_3 \tag{19}$$

des zweiten. Das ist in allen drei Dimensionen eine Translation. In den Charaktertafeln sind Translationen durch $T_x$, $T_y$, $T_z$ gekennzeichnet.

Wird die Bewegung sämtlicher Atome betrachtet, so folgt

$$\chi'(\mathbf{1}) = (14 - 2)\,3 = 36, \qquad \chi'(\boldsymbol{i}) = 0 \cdot (-3) = 0 \tag{20}$$

und daher

$$n'(A_\mathrm{g}) = \frac{1}{2}[1 \cdot 1 \cdot 36 + 1 \cdot 1 \cdot 0] = 18, \tag{21}$$

$$n'(A_\mathrm{u}) = \frac{1}{2}[1 \cdot 1 \cdot 36 + 1 \cdot (-1) \cdot 0 = 18. \tag{22}$$

Die Zahlen für die Translation ändern sich nicht, dagegen erhält man für $A_\mathrm{g}$ drei Rotationen.



## Aufgaben

A 6.3.1. Teilen Sie die Symmetriegruppe $C_\mathrm{s}$ in Klassen ein.

A 6.3.2. Teilen Sie die Symmetriegruppe $T_\mathrm{d}$ des Tetraeders (vgl. 6.1.1.) in Klassen ein und bestimmen Sie die Anzahl der Elemente für jede Klasse.

A 6.3.3. Beweisen Sie, daß ein Element nicht gleichzeitig zwei verschiedenen Klassen angehören kann.

A 6.3.4. Gilt für ein Element $\boldsymbol{a} \cdot \boldsymbol{a}^n = \mathbf{1}$ und bezeichnet $n$ die kleinste positive ganze Zahl mit dieser Eigenschaft, so heißt $n$ die Ordnung des Elements. Beweisen Sie, daß alle Elemente einer Klasse von gleicher Ordnung sind.

A 6.3.5. Die Spur eines Matrizenproduktes ist von der Reihenfolge der Faktoren unabhängig. Beweisen Sie auf Grund dieser Tatsache, daß die Charaktere konjugierter Elemente gleich sind.

A 6.3.6. Bestimmen Sie die Symmetrieoperationen der Gruppe $D_{3\mathrm{h}}$ und teilen Sie diese in Klassen ein.

A 6.3.7. Beweisen Sie aus der Definition konjugierter Elemente, daß die Klassensummen stets im Zentrum der Gruppenalgebra liegen.

A 6.3.8. Beweisen Sie aus der Eigenschaft, daß ein Zentrumselement mit jedem Gruppenelement vertauschbar ist, daß die Koeffizienten $n_j$ in der Darstellung

$$\xi_Z = \sum_j n_j \sigma_j$$

für alle Elemente einer Klasse gleich sind.

A 6.3.9. Das Basissystem orthogonaler Idempotente des Zentrums habe die Dimension $n$. Wie groß ist die Anzahl der Idempotente des Zentrums?

A 6.3.10. Geben Sie aus der Charaktertafel das Basissystem orthogonaler Idempotente im Zentrum der Gruppe $C_{2\mathrm{h}}$ an.

A 6.3.11. Beweisen Sie indirekt aus der Vollständigkeit die Gleichung $\sum_i \pi_i = \mathbf{1}$ für ein Basissystem orthogognaler Idempotente des Zentrums.

A 6.3.12. Beweisen Sie für ein Idempotent $\pi_i$ des Basissystems durch indirekten Schluß, daß $\pi_i$ nicht als Summe zweier orthogonaler Idempotente des Zentrums dargestellt werden kann.

A 6.3.13. Es sei $\pi$ ein Idempotent des Zentrums. Zeigen Sie, daß $\pi$ als Summe von Idempotenten des vollständigen Systems $S$ dargestellt werden kann, indem Sie indirekt beweisen, daß für alle $\pi_i$ von $S$ entweder $\pi_i \cdot \pi = 0$ oder $\pi_i \cdot \pi = \pi_i$ gilt.

A 6.3.14. Beweisen Sie, daß orthogonale Idempotente linear unabhängig sind.

A 6.3.15. Beweisen Sie aus der Unzerlegbarkeit der Idempotente des vollständigen Systems $S$, daß es nur ein solches System gibt.

A 6.3.16. Bestimmen Sie die Anzahl der Schwingungen für die Symmetrierassen des Naphthalins $C_{10}H_8$ (Punktgruppe $D_{2\mathrm{h}}$).

A 6.3.17. Untersuchen Sie, für welche Symmetrierassen der Punktgruppe $D_{2h}$ Translationen auftreten.

A 6.3.18. Für welche Symmetrierassen der Punktgruppe $D_{2h}$ treten Rotationen auf?

A 6.3.19. Zerlegen Sie den Vektorraum des Wassermoleküls nach den Symmetrietypen der Gruppe.

A 6.3.20. Untersuchen Sie die Symmetrietypen der Gruppe des Wassermoleküls in bezug auf Symmetrieoperationen.

A 6.3.21. Berechnen Sie aus der Charaktertafel $\chi(\boldsymbol{C}_3)$ für das $NH_3$-Molekül bezüglich der eigentlichen und der uneigentlichen Schwingungen. Vergleichen Sie das Ergebnis mit dem nach 6.2.4. und 6.2.5.

A 6.3.22. Beweisen Sie aus den Eigenschaften der Idempotente des Zentrums, daß die Charaktere $\chi(\boldsymbol{\sigma}_{ji})$ einer Gruppe $G$ die Orthogonalitäts- und Normierungsbedingung

$$\frac{1}{h} \sum_{j=1}^{r} \varrho_j \chi(\boldsymbol{\sigma}_{ji}) \, \chi(\boldsymbol{\sigma}_{jl}) = \delta_{il}$$

erfüllen ($\varrho_j$ Anzahl der Elemente in der $j$-ten Klasse).

A 6.3.23. Zeigen Sie aus den Gesetzen der Überlagerung, daß die Gesamtheit der Vektoren einer Symmetrierasse einen $G$-invarianten Unterraum bilden.

A 6.3.24. Beweisen Sie aus der Idempotenz von $\pi_i$, daß jeder Vektor $\pi_i \boldsymbol{X}$ zum $i$-ten Symmetrietyp gehört und daß die Vektoren $\pi_i \boldsymbol{b}_1, \ldots, \pi_i \boldsymbol{b}_n$ den Unterraum $U_i$ aufspannen.

A 6.3.25. Beweisen Sie aus $\sum_i \pi_i = 1$, daß jeder Vektor $\boldsymbol{X}$ aus $V$ sich als Summe von Vektoren $\boldsymbol{X}_i$ der $G$-invarainten Unterräume $U_i$ darstellen läßt. Zeigen Sie aus der Orthogonalität der Idempotente des Zentrums, daß diese Zerlegung eindeutig ist.

# 7. Molekülspektren

## 7.1. Streustrahlung



### Einführung

*Atom- und Molekülspektren*

Atomspektren werden nach 5.1. durch Elektronenübergänge in der Elektronenhülle eines Atoms verursacht. Sie bestehen aus Serien von Linien, die gegen eine Bandgrenze konvergieren.
Dagegen setzt sich das Spektrum des Moleküls aus mehreren Anhäufungen einer großen Zahl von Linien zusammen. Sie weisen zum Teil konstante Abstände auf. Jede derartige Anhäufung heißt eine Bande. Sie beschränkt sich auf einen engen Spektralbereich. Das Spektrum des Moleküls entsteht durch Elektronenübergänge sowie durch Anregung oder Änderung von Schwingungen und Rotationen seiner Bausteine. Aus dem Molekülspektrum kann daher auf Struktur, Art der Bindung, Bindungskräfte und die beteiligten Massen geschlossen werden. Wichtigste Arbeitsmethoden zur Untersuchung der Rotationen und der Schwingungen sind die Infrarotspektroskopie (IR-Spektroskopie) und die RAMAN-Spektroskopie.

*IR-Spektroskopie*

Die IR-Spektroskopie untersucht das Molekülspektrum im allgemeinen in der Absorption. Wie die Messungen zeigen, sind die Wellenzahlen der IR-Spektroskopie um Größenordnungen kleiner als die der Elektronenspektroskopie. Daher ist die Anregungsenergie für intermolekulare Rotationen und Schwingungen um Größenordnungen kleiner als für Elektronenübergänge.
Bei der Umwandlung von Strahlungs- in Schwingungsenergie wird nicht nur Licht absorbiert, dessen Frequenz mit der Grundfrequenz übereinstimmt, es kann auch die Summe der Frequenzen zweier gleicher oder verschiedener intermolekularer Schwingungen als Ober- oder Kombinationsschwingung im Absorptionsspektrum auftreten. Diese Linien sind ebenfalls im IR-Spektrum zu beobachten.

*Raman-Spektroskopie*

Emittiert eine Lichtquelle eine oder mehrere intensive Spektrallinien und fällt dieses Licht auf eine Probe aus Molekülen, so weist die spektrale Zerlegung des an der Probe gestreuten Lichtes außer den Erregerlinien ein Spektrum dagegen frequenzverschobener Linien auf. Diese Frequenzverschiebung wird als SMEKAL-RAMAN-Effekt bezeichnet. Sie wurde im Jahre 1923 von A. SMEKAL auf Grund quantentheoretischer Berechnungen vorausgesagt und im Jahre 1927 von C. V. RAMAN experimentell nachgewiesen.
Die unverschobenen Linien heißen **Rayleigh-**, die frequenzverschobenen **Raman-Linien.** Das RAMAN-Spektrum ist gegenüber dem Erregerlicht nur von sehr schwacher Intensität. Zur Erzeugung eines RAMAN-Spektrums ausreichender Intensität bestrahlt

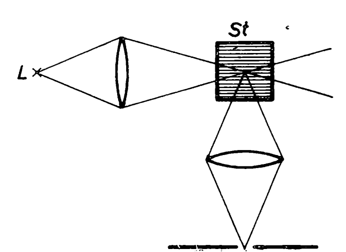



Bild 7.1.1. Versuchsaufbau beim SMEKAL-RAMAN-Effekt. St Streukörper

man die Probe daher im allgemeinen mit Laserlicht. Bild 7.1.1 zeigt den Versuchsaufbau. Das RAMAN-Spektrum liegt im Sichtbaren, im nahen Infrarot oder im Ultraviolett. Es entsteht durch Überlagerung der intermolekularen Rotation oder Schwingung auf die Bewegung eines Elektrons.

*Polarisation und Polarisierbarkeit*

Das Molekül mit den gegeneinander verschobenen elektrischen Ladungen $q$ und $-q$ stellt einen elektrischen Dipol dar. Bezeichnet $\boldsymbol{h}$ den Vektor, gezogen von $-q$ nach $+q$, so gibt

$$\boldsymbol{m}_\mathrm{e} = q\boldsymbol{h} \tag{1}$$

das elektrische Dipolmoment des Moleküls an.
Die Polarisation $\boldsymbol{P}$ des Mediums ist durch

$$\boldsymbol{P} = N\boldsymbol{m}_\mathrm{e} \tag{2}$$

gegeben, wobei $N$ die Anzahl der Moleküle je Kubikmeter angibt. Zwischen dem elektrischen Feld $\boldsymbol{E}$ und dem elektrischen Dipolmoment $\boldsymbol{m}_\mathrm{e}$ besteht die Verknüpfung

$$\boldsymbol{m}_\mathrm{e} = \varepsilon_0 \alpha \boldsymbol{E}. \tag{3}$$

$\alpha$ wird als Tensor der Polarisierbarkeit definiert.
Die klassische Elektrodynamik und die Quantentheorie zeigen übereinstimmend, daß Wechselwirkung zwischen dem äußeren Strahlungsfeld und dem Molekül in Form von Emission oder Absorption nur möglich ist, wenn sich dabei das elektrische Dipolmoment $\boldsymbol{m}_\mathrm{e}$ des Moleküls ändert. Durch äußere Strahlung können daher in einem Molekül nur solche Rotationen und Schwingungen angeregt und in der IR-Spektro-

skopie nachgewiesen werden, die mit einer Änderung des elektrischen Dipolmoments verknüpft sind. Rotationen und Schwingungen, die $m_e$ nicht verändern, müssen durch Elektronenübergänge, d. h. durch RAMAN-Spektroskopie, untersucht werden.
Die Frequenzen des RAMAN-Spektrums liegen etwa eine Größenordnung über denen der Molekülschwingungen. Das elektrische Feld des einfallenden Lichtes verschiebt beim SMEKAL-RAMAN-Effekt in erzwungener Schwingung die Elektronenwolke des Moleküls, während die Atomkerne den hohen Frequenzen nicht zu folgen vermögen. Damit wird die Verschiebbarkeit der Ladungen, d. h. die Polarisierbarkeit des Moleküls, verändert. Auswahlregeln für IR-Übergänge gründen sich infolgedessen auf das elektrische Dipolmoment, für RAMAN-Übergänge auf die Polarisierbarkeit (vgl. 7.3.).



## Probleme

### 7.1.1. Smekal-Raman-Effekt als Stoßprozeß

Stellen Sie den SMEKAL-RAMAN-Effekt als Stoßprozeß eines Lichtquants mit einem Molekül dar.
Bei der Bestrahlung von Chloroform $CHCl_3$ mit Laserlicht der Wellenzahl $\frac{1}{\lambda_0} = 4{,}36 \cdot 10^5\ \text{m}^{-1}$ wird das RAMAN-Spektrum nach Bild 7.1.2 beobachtet. Untersuchen Sie auf Grund dessen den Effekt quantitativ. Wie verändern die Stöße der Lichtquanten die mittlere Geschwindigkeit der Moleküle? Interpretieren Sie das Spektrum der Streustrahlung.

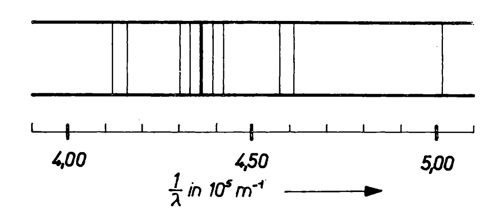



Bild 7.1.2. RAMAN-Linien

**Lösung:**

Trifft ein Lichtquant mit der Energie $hf_0$ auf ein Molekül der Masse $M$, so können sich dessen Geschwindigkeit von $v_0$ auf $v$ und dessen Energiezustand von $W_k$ auf $W_l$ ändern. Das Lichtquant wird gestreut. Seine Energie nach dem Stoß beträgt $hf$. Der Energiesatz bedingt

$$hf_0 + \frac{M}{2} v_0^2 + W_k = hf + \frac{M}{2} v^2 + W_l. \tag{1}$$

Bezeichnet $\boldsymbol{k}_0$ den Wellenzahlvektor vor dem Stoß, $\boldsymbol{k}$ den der Streustrahlung, so folgt für den Impuls des Quants vor dem Stoß

$$\hbar\, |\boldsymbol{k}_0| = \hbar \frac{2\pi}{\lambda_0} = \frac{h}{\lambda_0}. \tag{2}$$

$\lambda_0$ gibt die Wellenlänge der einfallenden Strahlung an.
Aus dem Impulserhaltungssatz ergibt sich

$$h \,\Delta \frac{1}{\lambda} = h \left(\frac{1}{\lambda_0} - \frac{1}{\lambda}\right) = M(v - v_0). \tag{3}$$

Im vorliegenden Fall erhält man als größte Wellenlängenverschiebung nach Bild 7.1.2

$$\Delta \frac{1}{\lambda} = (5{,}01 - 4{,}36) \cdot 10^5 \text{ m}^{-1} = 0{,}65 \cdot 10^5 \text{ m}^{-1}.$$

Die relative Molekülmasse für $CHCl_3$ beträgt 120. Als Änderung des Betrages der Geschwindigkeit ergibt sich daher nach (3)

$$|\Delta v| = |v - v_0| = \frac{6{,}626 \cdot 10^{-34} \cdot 0{,}65 \cdot 10^5}{120 \cdot 1{,}66 \cdot 10^{-27}} \text{ m s}^{-1} = 2{,}16 \cdot 10^{-4} \text{ m s}^{-1}.$$

Rechnet man mit einer mittleren Geschwindigkeit des Moleküls von 200 m s$^{-1}$, so ergibt sich für die Änderung der kinetischen Energie

$$\frac{M}{2}(v^2 - v_0^2) = M v_0 \Delta v = 1{,}66 \cdot 10^{-27} \cdot 200 \cdot 2{,}16 \cdot 10^{-4} \text{ J} = 7{,}2 \cdot 10^{-29} \text{ J}. \tag{4}$$

Im Vergleich dazu ändert sich die Energie der Lichtquanten um

$$h(f_0 - f) = hc\left(\frac{1}{\lambda_0} - \frac{1}{\lambda}\right) = 6{,}626 \cdot 10^{-34} \cdot 3 \cdot 10^8 \cdot 0{,}65 \cdot 10^5 \text{ J}$$
$$= 1{,}3 \cdot 10^{-20} \text{ J}. \tag{5}$$

Aus dem Vergleich von (4) und (5) folgt, daß die Änderung der kinetischen Energie gegen die Änderung der Strahlungsenergie vernachlässigt werden kann:

$$h\,|f - f_0| \gg \frac{M}{2}\,|v^2 - v_0^2|. \tag{6}$$

Der Energiesatz läßt sich daher in der Form

$$-\Delta f = f_0 - f = \frac{W_l - W_k}{h} \quad \text{bzw.} \quad -\Delta \frac{1}{\lambda} = \frac{1}{\lambda_0} - \frac{1}{\lambda} = \frac{W_l - W_k}{hc} \tag{7}$$

schreiben. Es sind danach drei Fälle möglich:

1. $\Delta f < 0$. Das Molekül wird in einen höheren Energiezustand $W_l > W_k$ gehoben. Man erhält eine gegen das Erregerlicht nach kleineren Wellenzahlen verschobene Linie. Die nach Rot verschobenen Linien werden als **stokessche Linien** bezeichnet.

2. $\Delta f = 0$. Der Energiezustand des Moleküls ändert sich nicht: $W_l = W_k$. Es liegt **Rayleigh-Streuung** vor.

3. $\Delta f > 0$. Das angeregte Molekül gibt beim Stoß Energie an das Strahlungsfeld ab. Es treten blauverschobene Linien auf. Sie werden als **antistokessche Linien** bezeichnet.

### 7.1.2. Compton-Effekt

Röntgenstrahlen fallen auf einen Paraffinblock und werden hier gestreut. Dabei tritt in Abhängigkeit von der Beobachtungsrichtung eine Frequenzverschiebung auf. Dieser Effekt heißt COMPTON-Effekt. Er kann als elastischer Stoß zwischen einem Lichtquant und einem Elektron gedeutet werden, da bei Paraffin die Außenelektronen nur schwach gebunden sind.
Leiten Sie nach diesem Modell unter der Voraussetzung, daß die Ablösearbeit vernachlässigt werden kann, die Formel für die Wellenlängenverschiebung ab.
Welche Wellenlänge wird bei Einstrahlung des Lichtes der Wellenlänge $\lambda = 1{,}0$ nm senkrecht zum einfallenden Licht gemessen?

**Lösung:**

Die Massenveränderlichkeit des abgelösten Elektrons muß berücksichtigt werden. Wir rechnen daher relativistisch.
Die Energie des auftreffenden Lichtquants spaltet sich in die Energie des gestreuten Quants und die Bewegungsenergie des Elektrons auf:

$$\frac{hc}{\lambda_0} = \frac{hc}{\lambda} + (m - m_0)\, c^2. \tag{1}$$

($c$ Lichtgeschwindigkeit, $m$ Elektronenmasse in Bewegung, $m_0$ Elektronenruhmasse). Die Änderung der kinetischen Energie des Moleküls bleibt nach (7.1.1./6) unberücksichtigt.

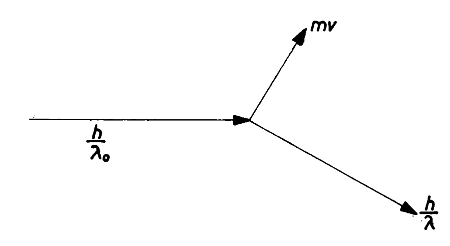



Bild 7.1.3. Impulserhaltungssatz beim COMPTON-Effekt

Der Impuls des stoßenden Quants spaltet sich ebenfalls auf. Bezeichnet $\vartheta$ die Bewegungsrichtung des abfliegenden Elektrons gegen die des stoßenden Quants, $\varphi$ den Streuwinkel, so gilt nach dem Impulserhaltungssatz (vgl. Bild 7.1.3)

$$\frac{h}{\lambda_0} = \frac{h}{\lambda} \cos\varphi + mv \cos\vartheta, \tag{2}$$

$$0 = \frac{h}{\lambda} \sin\varphi + mv \sin\vartheta. \tag{3}$$

Da nur der Streuwinkel des Lichtes von Interesse ist, kann $\vartheta$ eliminiert werden. Aus (2) und (3) folgt

$$\frac{h^2}{\lambda_0^2} + \frac{h^2}{\lambda^2} - \frac{2h^2}{\lambda\lambda_0} \cos\varphi = m^2 v^2. \tag{4}$$

Andererseits kann man (1) in der Form

$$\frac{h^2}{\lambda_0^2} + \frac{h^2}{\lambda^2} - \frac{2h^2}{\lambda\lambda_0} = (m - m_0)^2\, c^2 \tag{5}$$

schreiben, woraus sich wegen $1 - \cos\varphi = 2 \sin^2 \frac{\varphi}{2}$ durch Subtraktion

$$\frac{4h^2}{\lambda\lambda_0} \sin^2 \frac{\varphi}{2} = 2m_0(m - m_0)\, c^2 \tag{6}$$

ergibt. Nach (1) ist

$$(m - m_0)\, c^2 = \frac{hc}{\lambda\lambda_0} (\lambda - \lambda_0) = \frac{hc}{\lambda\lambda_0} \Delta\lambda, \tag{7}$$

so daß wir aus (6)

$$\Delta\lambda = \lambda - \lambda_0 = 2\lambda_c \sin^2 \frac{\varphi}{2} \tag{8}$$

erhalten. Die Größe

$$\lambda_c = \frac{h}{m_0 c} = \frac{6{,}626 \cdot 10^{-34}}{9{,}109 \cdot 10^{-31} \cdot 2{,}998 \cdot 10^8}\,\mathrm{m} = 2{,}426 \cdot 10^{-12}\,\mathrm{m} \tag{9}$$

heißt **Compton-Wellenlänge.**
Für $\varphi = 90°$ erhält man aus (8)

$$\Delta\lambda = 2 \cdot 2{,}426 \cdot 10^{-12} \cdot 0{,}707^2\,\mathrm{m} = 2{,}426 \cdot 10^{-12}\,\mathrm{m},$$

d. h.

$$\lambda = 1{,}0024\,\mathrm{nm}.$$

### 7.1.3. Rayleigh-Streuung eines isotropen Moleküls

Das oszillierende Molekül kann als elektrischer Dipol angesehen werden, der durch das äußere Feld zur Schwingung angeregt wird. Bestimmen Sie nach diesem Modell die Intensität der RAYLEIGH-Streuung eines Moleküls in einem isotropen verdünnten Gas. Welche Streustrahlung verursacht ein Gasmedium aus 10 g Argon, wenn auf dieses Laserlicht der Wellenlänge $\lambda_0 = 500\,\mathrm{nm}$ und der Intensität $S_0 = 10^{10}\,\mathrm{W\,m^{-2}}$ fällt? Argon besitzt die Polarisierbarkeit $\alpha = 1{,}62 \cdot 10^{-30}\,\mathrm{m^3}$ (vgl. [5] 3.2.). Seine Atommasse beträgt $A = 39{,}4$ kg/kmol.

**Lösung:**

Durch das betrachtete Medium pflanze sich eine Lichtwelle fort, die durch ihre in Richtung der $z$-Achse schwingende elektrische Feldstärke

$$E_z = E_0\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega_0\left(t - \frac{y}{c}\right)} \tag{1}$$

gegeben ist. Das der Messung zugängliche makroskopische Feld $\boldsymbol{E}$ unterscheidet sich vom effektiven, auf das Molekül wirkende Feld $\hat{\boldsymbol{E}}$ , in dem die Ladungen des betrachteten Moleküls nicht erfaßt sind, auf Grund der Beziehung

$$\hat{\boldsymbol{E}} = \frac{2\varepsilon_0 + \varepsilon'}{3\varepsilon_0}\boldsymbol{E} \tag{2}$$

($\varepsilon'$ Dielektrizitätskonstante des Mediums, $\varepsilon_0$ elektrische Feldkonstante, vgl. 1.4./25). Bei verdünnten Gasen kann genähert $\varepsilon' = \varepsilon_0$ gesetzt werden.
Bezeichnet $N$ die Anzahl der Moleküle je Kubikmeter, $\boldsymbol{m}_\mathrm{e}$ ihr elektrisches Dipolmoment, so ist die Polarisation des Gases nach (7.1./2) durch

$$\boldsymbol{P} = N\boldsymbol{m}_\mathrm{e} \tag{3}$$

gegeben.
Das Dipolmoment ergibt sich aus (7.1./1):

$$\boldsymbol{m}_\mathrm{e} = q\boldsymbol{h}. \tag{4}$$

Das elektrische Moment ist mit dem elektrischen Feld durch

$$\boldsymbol{m}_\mathrm{e} = \alpha\varepsilon_0\boldsymbol{E} \tag{5}$$

verknüpft.

Aus (3) und (5) folgt für $\boldsymbol{E} = \hat{\boldsymbol{E}}$

$$\boldsymbol{P} = N\varepsilon_0\alpha\boldsymbol{E}. \tag{6}$$

Die von einem **schwingenden** Dipol abgestrahlte Leistung beträgt

$$\dot{W} = \frac{2}{3} \pi Z \frac{h^2}{\lambda_0^2} I_{\text{eff}}^2 \tag{7}$$

(vgl. [4] 5.1.1./20), wobei $h$ die Dipollänge angibt.

$$Z = \sqrt{\frac{\mu}{\varepsilon}} \approx \sqrt{\frac{\mu_0}{\varepsilon_0}} = 120\,\pi\,\Omega = 377\,\Omega \tag{7a}$$

kennzeichnet den Wellenwiderstand des Gases bzw. angenähert den des Vakuums, $\mu_0$ die magnetische Feldkonstante. Die Stromstärke $I = I(t)$ ist mit dem Dipolmoment $\boldsymbol{m}_e = \boldsymbol{m}_e(t)$ durch

$$\frac{\partial \boldsymbol{m}_e}{\partial t} = I(t)\,\boldsymbol{h} \tag{8}$$

verknüpft (vgl. [4] 5.1./23). Bei harmonischen Schwingungen ist

$$\boldsymbol{m}_e(t) = \boldsymbol{m}_{e0}\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega_0 t}. \tag{9}$$

Für die effektive Stromstärke folgt damit aus (8)

$$I_{\text{eff}} = \frac{1}{2}\sqrt{2}\,I_{\max} = \frac{1}{2}\sqrt{2}\,\frac{1}{h}\,m_{e0}\,\omega_0 \tag{10}$$

mit

$$m_{e0} = qh. \tag{10a}$$

Setzt man (10) zusammen mit (7a) in (7) ein, ergibt sich

$$\dot{W} = \frac{1}{12\pi c^2}\sqrt{\frac{\mu_0}{\varepsilon_0}}\,m_{e0}^2\omega_0^4 = \frac{1}{12\pi c^2}\sqrt{\frac{\mu_0}{\varepsilon_0}}\,\frac{\boldsymbol{P}_0^2\omega_0^4}{N^2}, \tag{11}$$

worin $\boldsymbol{P}_0$ die Amplitude der Polarisation des Gases angibt. Mittels (6) und unter Berücksichtigung von $\sqrt{\varepsilon_0\mu_0} = \frac{1}{c}$ erhält man für die Ausstrahlung eines isotropen Moleküls

$$\dot{W} = \frac{4}{3}\pi^3\sqrt{\frac{\varepsilon_0}{\mu_0}}\,\frac{\alpha^2\boldsymbol{E}_0^2}{\lambda_0^4}. \tag{12}$$

Zwischen der Intensität $S_0$ der einfallenden Lichtwelle und der Amplitude $\boldsymbol{E}_0$ ihrer elektrischen Feldstärke besteht die Beziehung

$$S_0 = \frac{1}{2}\,\frac{E_0^2}{\sqrt{\frac{\mu_0}{\varepsilon_0}}}, \tag{13}$$

so daß man anstelle von (12)

$$\dot{W} = \frac{8}{3}\pi^3 S_0\,\frac{\alpha^2}{\lambda_0^4} \tag{14}$$

erhält.
Mit den vorgegebenen Werten folgt

$$\dot{W} = \frac{8}{3}\pi^3 10^{10}\,\frac{(1{,}62\cdot 10^{-30})^2}{(500\cdot 10^{-9})^4}\,\mathrm{W} = 3{,}5\cdot 10^{-23}\,\mathrm{W}.$$

Das ist um mehrere Größenordnungen weniger als ein Strahlungsquant je Sekunde. Für die Ausstrahlung des Mediums erhält man

$$N\dot{W} = \frac{10 \cdot 10^{-3}}{39,4} 6,02 \cdot 10^{26} \cdot 3,5 \cdot 10^{-23}\,\text{W} = 5,3\,\text{W}.$$



## Aufgaben

A 7.1.1. Stellen Sie die Formel für die kinetische Energie des ausgelösten Elektrons beim COMPTON-Effekt auf, wenn das gestreute Lichtquant senkrecht zum einfallenden Strahl gerichtet ist.

A 7.1.2. Wie groß ist die Geschwindigkeit des ausgelösten Elektrons beim COMPTON-Effekt, wenn als einfallendes Licht $\gamma$-Strahlen der Wellenlänge 0,01 nm verwendet werden und das gestreute Quant senkrecht zum einfallenden Strahl gerichtet ist?

A 7.1.3. Welche Intensität der einfallenden Strahlung ist erforderlich, um nach der klassischen Theorie durch RAYLEIGH-Streuung an Tetrachlorkohlenstoff $CCl_4$ im Mittel eine Ausstrahlung von einem Quant je Sekunde und je Molekül zu erhalten? Die Frequenz sei $f_0 = 5 \cdot 10^{14}$ Hz.

A 7.1.4. Ein Glaskolben enthalte 10 g $CCl_4$ als verdünntes Gas. Wie groß ist die Ausstrahlung durch RAYLEIGH-Streuung, wenn auf das Gas eine Lichtwelle der Intensität $10^6$ W m$^{-2}$ gerichtet wird? Die Wellenlänge sei $\lambda_0 = 600$ nm.

A 7.1.5. Auf eine Wasserstoffkugel im Weltraum von 10000 km Radius und mit der Konzentration $10^{16}$ m$^{-3}$ fällt eine ausgedehnte elektromagnetische Strahlung der Wellenlänge $\lambda_0 = 1$mm. Die Amplitude der Feldstärke betrage $10^{-3}$ V m$^{-1}$. Berechnen Sie die Größenordnung der RAYLEIGH-Strahlung.

## 7.2. Rotations-, Schwingungs- und Rotationsschwingungsspektren



### Einführung

*Energiezustände des Elektrons*

Die Energie eines mehratomigen Moleküls setzt sich näherungsweise additiv aus der Energie der Elektronenhülle sowie der Oszillations- und der Rotationsenergie seiner Kerne zusammen:

$$W = W_{\text{el}} + W_{\text{osz}} + W_{\text{rot}}. \tag{1}$$

Für die Energie des harmonischen Oszillators erhält man ([2] 4.4., 232/11)

$$W_{\text{osz}} = \hbar\omega_{\text{osz}}\left(n + \frac{1}{2}\right) \qquad (n = 0, 1, 2, \ldots). \tag{2}$$

Darin gibt $\omega_{\text{osz}}$ die Kreisfrequenz der Schwingung an.
Die Energie der Molekülrotation ist durch

$$W_{\text{rot}} = \frac{1}{2} I\omega_{\text{rot}} = \frac{L^2}{2I} \tag{3}$$

bestimmt ($\omega_{\text{rot}}$ Kreisfrequenz der Rotation, $I$ zugehöriges Trägheitsmoment). Nach (5.1./20) erhält man für das Quadrat des Drehimpulses $\boldsymbol{L}$

$$\boldsymbol{L}^2 = l(l + 1)\,\hbar^2. \tag{4}$$

Setzt man (4) in (3) ein, so kann man die Rotationsenergie in der Form

$$W_{\text{rot}} = \frac{\hbar^2}{2I}\left(l + \frac{1}{2}\right)^2 - \frac{\hbar^2}{8I} \tag{5}$$

schreiben.
Bei zweiatomigen Molekülen folgt das Trägheitsmoment aus

$$I = mr^2, \tag{6}$$

wobei die reduzierte Masse $m$ durch die Massen der beiden Atome

$$m = \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2}, \tag{7}$$

der Abstand $r$ durch die Abstände vom gemeinsamen Schwerpunkt

$$r = r_1 + r_2 \tag{8}$$

gegeben ist (vgl. Bild 7.2.1).

*Einfluß der Molekülrotation und -oszillation auf die Bande*

Die Quantenübergänge der Elektronen verschieben das Rotationsschwingungsspektrum in den Bereich höherer Frequenzen, sind jedoch ohne Einfluß auf die Struktur einer Bande. Sie werden im folgenden außer acht gelassen.
Reine Schwingungsspektren werden im mittleren Infrarot bei Wellenzahlen zwischen $10^2$ und $10^4$ cm$^{-1}$ beobachtet. Für Schwingungsübergänge sind daher Anregungsenergien erforderlich, die etwa eine Größenordnung unter denen von Elektronenübergängen liegen.
Reine Rotationsspektren sind im fernen Infrarot und im Mikrowellenbereich bei Wellenzahlen $1 \cdots 100$ cm$^{-1}$ anzutreffen. Die Energiebeiträge der Rotationen liegen somit um etwa zwei Größenordnungen unter denen von Oszillationen.
Die gleichzeitige Anregung bzw. Änderung von Schwingungen und Rotationen führt zu Rotationsschwingungsbanden. In ihnen bestimmt die Schwingungsenergie die Lage des Spektrums im Infrarot, während die Rotationsterme die Bandenstruktur beeinflussen.



## Probleme

### 7.2.1. Starrer Rotator

Der starre Rotator wird durch das Modell nach Bild 7.2.1 veranschaulicht. Die Massen rotieren um den gemeinsamen Schwerpunkt $S$ im konstanten Abstand.
Stellen Sie die Theorie der Spektrallinien des starren Rotators auf.

Im RAMAN-Spektrum des linearen $CO_2$-Moleküls treten bei tiefen Temperaturen, bei denen die Oszillationen, nicht jedoch die Rotationen eingefroren sind (vgl. [3] 4.4.1.), Linien mit dem konstanten Wellenzahlabstand $\Delta \frac{1}{\lambda} = 76{,}7\ \mathrm{m}^{-1}$ auf. Bestimmen Sie daraus das Trägheitsmoment des Moleküls und die Gleichgewichtslage der Atome.

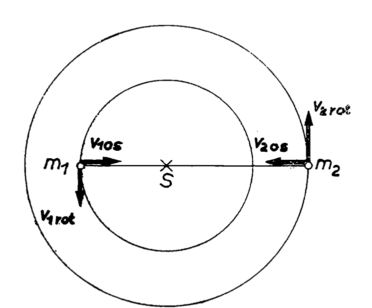



Bild 7.2.1. Oszillationen und Rotationen eines zweiatomigen Moleküls

**Lösung:**

Für die Änderung der Rotationsenergie infolge von Quantenübergängen zwischen verschiedenen Rotationszuständen $l$ bei konstantem Trägheitsmoment $I$ folgt nach (7.2./5)

$$\Delta W_{\mathrm{rot}} = \frac{\hbar^2}{2I} (2l + 1) \Delta l. \tag{1}$$

Die Übergangsregel für die Rotationsquantenzahl $l$ lautet nach (5.1./25)

$$\Delta l = \pm 1. \tag{2}$$

Als Rotationskonstante bezeichnet man

$$B = \frac{\hbar}{4\pi c I}. \tag{3}$$

Mit den Werten für $h$ und $c$ ergibt sich

$$B = \frac{6{,}626 \cdot 10^{-34}\ \mathrm{kgm}}{8\pi^2 \cdot 2{,}998 \cdot 10^8\ I} = \frac{2{,}799 \cdot 10^{-44}}{I}\ \mathrm{kg\ m}. \tag{3a}$$

Damit folgt für die Wellenzahl der emittierten Strahlung

$$\Delta \frac{1}{\lambda} = \frac{\Delta W}{2\pi\hbar c} = (2l + 1) B \qquad (l = 0,\ 1,\ 2,\ \ldots). \tag{4}$$

Der Wellenzahlabstand benachbarter Rotationslinien ist bei einem starren Rotator somit konstant. Aus seiner Messung folgt

$$B = \frac{1}{2} \Delta \frac{1}{\lambda}, \tag{5}$$

im vorliegenden Falle

$$B = \frac{1}{2} \cdot 76{,}7\ \mathrm{m}^{-1} = 38{,}35\ \mathrm{m}^{-1}.$$

Damit erhält man aus (3a) durch Auflösen nach $I$

$$I = \frac{2{,}799 \cdot 10^{-44}}{38{,}35} \text{ kg m}^2 = 7{,}3 \cdot 10^{-46} \text{ kg m}^2.$$

Das C-Atom im Schwerpunkt $S$ bleibt bei der Rotation in Ruhe. Die Massen der beiden Sauerstoffatome sind gleich, so daß man für die reduzierte Masse des Rotators

$$m = \frac{m_O}{2} = \frac{1}{2} \cdot 16 \cdot 1{,}66 \cdot 10^{-27} \text{ kg} = 1{,}33 \cdot 10^{-26} \text{ kg}$$

erhält. Damit folgt für den Abstand $r_{CO}$

$$r_{CO} = \frac{1}{2} \sqrt{\frac{7{,}3 \cdot 10^{-46}}{1{,}33 \cdot 10^{-26}}} \text{ m} = 1{,}17 \cdot 10^{-10} \text{ m}.$$

### 7.2.2. Oszillierender Rotator

Das Rotationsschwingungsspektrum entsteht durch gleichzeitige Änderung der Rotations- und der Schwingungsenergie des Moleküls bei einem Quantenübergang. Untersuchen Sie die Gesetzmäßigkeiten des Spektrums eines rotierenden Oszillators.
In den Rotationsschwingungsbanden des Chlorwasserstoffs werden zwei Zweige beobachtet, die durch eine Lücke voneinander getrennt sind. Die Absorptionsmaxima links und rechts der Lücke liegen bei

$$\left(\frac{1}{\lambda}\right)_{-1} = 2{,}96607 \cdot 10^5 \text{ m}^{-1}, \qquad \left(\frac{1}{\lambda}\right)_1 = 3{,}00777 \cdot 10^5 \text{ m}^{-1}.$$

Bestimmen Sie daraus die Molekülkonstanten. Die Änderung des Atomabstandes infolge von Schwingungsübergängen werde in erster Näherung vernachlässigt.

**Lösung:**

Die Energie des rotierenden Oszillators ist nach (7.2./2) und (7.2./5) durch

$$W_{n,l} = \hbar\omega_{osz}\left(n + \frac{1}{2}\right) + \frac{\hbar^2}{2I}\left(l + \frac{1}{2}\right)^2 - \frac{\hbar^2}{8I} \tag{1}$$

gegeben. Für die Wellenzahl der Strahlung bei einem Quantenübergang $\Delta n$, $\Delta l$ folgt daraus

$$\left(\frac{1}{\lambda}\right)_{\Delta n, \Delta l} = \frac{\Delta W_{n,l}}{hc} = \frac{\omega_{osz}}{2\pi c} \Delta n + B(2l + 1)\,\Delta l \tag{2}$$

mit $B$ nach (7.2.1./3). Erfahrungsgemäß liegen die Wellenzahlen der Schwingungsspektren ein bis zwei Größenordnungen über denen der Rotationsspektren. Das Schwingungsquant ist deshalb ebenfalls ein bis zwei Größenordnungen über dem des Rotationsquants anzusetzen. Wir rechnen daher wegen $\Delta W_{n,l} > 0$ und auf Grund der Übergangsbedingungen nach 5.1. mit $\Delta n = +1$, jedoch $\Delta l = \pm 1$. Es folgt

$$\left(\frac{1}{\lambda}\right)_{\Delta l = \pm 1} = \frac{\omega_{osz}}{2\pi c} \pm B(2l + 1 \pm 1). \tag{3}$$

Das positive Vorzeichen kennzeichnet den rechten Zweig in Bild 7.2.2, der als $R$-Zweig bezeichnet wird. Die Absorptionsmaxima sind durch

$$\left(\frac{1}{\lambda}\right)_{\Delta l = +1} = \left(\frac{1}{\lambda}\right)_{l+1} = \frac{\omega_{osz}}{2\pi c} + 2B(l + 1) \qquad (l = 0, 1, 2, \ldots) \tag{4}$$

gegeben. Der $P$-Zweig links davon ist durch $\Delta l = -1$ gekennzeichnet. Daher fehlt $l = 0$, da negative Rotationsquantenzahlen nicht definiert sind. Man erhält somit für die Absorptionsmaxima des $P$-Zweiges

$$\left(\frac{1}{\lambda}\right)_{\Delta l=-1} = \left(\frac{1}{\lambda}\right)_{-l} = \frac{\omega_{\text{osz}}}{2\pi c} - 2Bl \qquad (l = 1, 2, \ldots). \tag{5}$$

Für die benachbarten Linien links und rechts der Absorptionslücke folgt

$$\left(\frac{1}{\lambda}\right)_1 + \left(\frac{1}{\lambda}\right)_{-1} = \frac{\omega_{\text{osz}}}{\pi c}, \tag{6}$$

$$\left(\frac{1}{\lambda}\right)_1 - \left(\frac{1}{\lambda}\right)_{-1} = 4B. \tag{7}$$

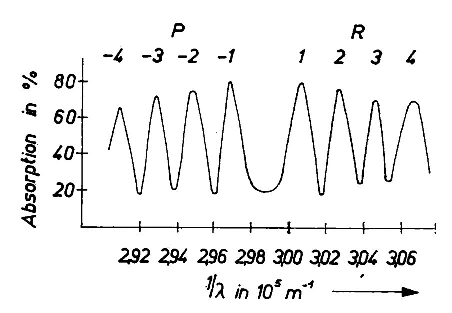



Bild 7.2.2. Rotationsschwingungsbande des Chlorwasserstoffs

Mit den vorgegebenen Werten erhält man für die Molekülkonstanten

$$f_{\text{osz}} = \frac{\omega_{\text{osz}}}{2\pi} = \frac{1}{2} \cdot 2{,}998 \cdot 10^8 (2{,}96607 + 3{,}00777) \cdot 10^5 = 8{,}955 \cdot 10^{13}\ \text{Hz},$$

$$B = \frac{1}{4}\,(3{,}00777 - 2{,}96607)\ 10^5\ \text{m}^{-1} = 1{,}043 \cdot 10^3\ \text{m}^{-1}.$$

Damit ergibt sich nach (7.2.1./3) für das Trägheitsmoment

$$I = \frac{\hbar}{4\pi c B} = \frac{6{,}626 \cdot 10^{-34}}{8\pi^2 \cdot 3 \cdot 10^8 \cdot 1{,}043 \cdot 10^3}\ \text{kg m}^2 = 2{,}68 \cdot 10^{-47}\ \text{kg m}^2.$$

Dieser Wert ist genauer als der aus dem Rotationsspektrum.
Für den Abstand der Atome mit der reduzierten Masse $m = 1{,}63 \cdot 10^{-27}$ kg folgt

$$r = \sqrt{\frac{2{,}68 \cdot 10^{-47}}{1{,}63 \cdot 10^{-27}}}\ \text{m} = 1{,}28 \cdot 10^{-10}\ \text{m}.$$

## 7.2.3. Fortrat-Diagramm

Bei einem Elektronensprung bleibt die Rotationsquantenzahl $l$ konstant oder ändert sich um $\pm 1$. Entsprechend diesen drei Möglichkeiten weist das Absorptionsspektrum der Moleküle drei Zweige auf, die als $P$-, $Q$-, $R$-Zweig bezeichnet werden.
Die drei Zweige werden im FORTRAT-Diagramm nach Bild 7.2.3 ausgewertet.

Für den $R$-Zweig, der durch die größten Wellenzahlen $\frac{1}{\lambda}$ gekennzeichnet ist, erhält man einen Bandenkopf, d. h. eine Häufung von Spektrallinien im Maximum der Wellenzahlen.
Ordnet man die Wellenzahlen den Rotationsquantenzahlen $l$ zu und bildet für gleiche Quantenzahlen $l$ die Differenz

$$\Delta = \left[\left(\frac{1}{\lambda}\right)_R - \left(\frac{1}{\lambda}\right)_Q\right] - \left[\left(\frac{1}{\lambda}\right)_Q - \left(\frac{1}{\lambda}\right)_P\right], \tag{1}$$

so ist diese für alle Werte $l$ konstant. Untersuchen Sie den Rotationsanteil der Wellenzahl einer Spektrallinie und begründen Sie die aufgeführten Untersuchungsergebnisse.

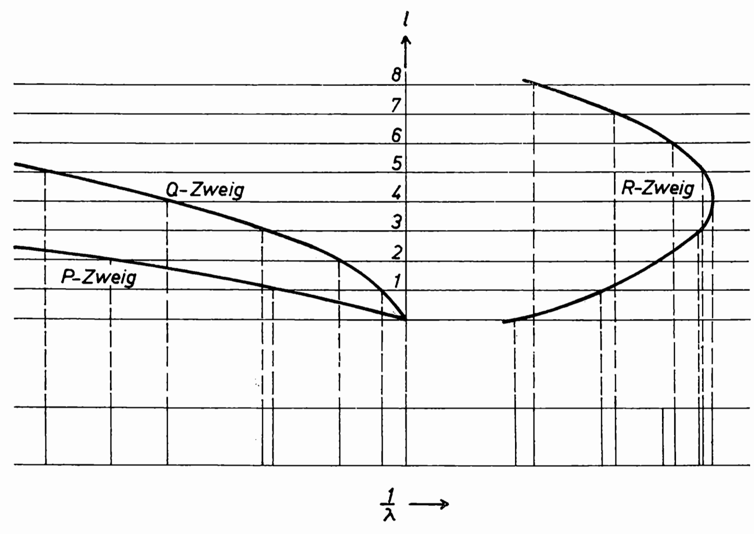



Bild 7.2.3. FORTRAT-Diagramm für $l_R = 4{,}1$

Die Auswertung des FORTRAT-Diagramms beim Wasserstoffmolekül ergibt einen Bandenkopf für $l = l_R = 13{,}2$. Für die Differenz $\Delta$ wird $\Delta = 5280 \text{ m}^{-1}$ gemessen. Welche Aussagen über das Molekül vor und nach dem Quantensprung lassen sich daraus ableiten?

**Lösung:**

Für die Rotationsenergie vor und nach dem Quantenübergang schreiben wir nach (7.2./3) und (7.2./4)

$$W_l = \frac{\hbar^2}{2I}\, l(l+1), \qquad W_{l'} = \frac{\hbar^2}{2I'}\, l'(l'+1). \tag{2}$$

$I$ und $l$ kennzeichnen das Trägheitsmoment und die Rotationsquantenzahl vor, $I'$ und $l'$ nach dem Quantenübergang. Für den Rotationsanteil der Wellenzahl eines Quantenüberganges folgt damit

$$\left(\frac{1}{\lambda}\right)_{\text{Rot}} = \frac{W_{l'} - W_l}{2\pi\hbar c} = \frac{\hbar}{4\pi c}\left[\frac{l(l+1)}{I} - \frac{l'(l'+1)}{I'}\right]. \tag{3}$$

Dabei gilt die Auswahlregel

$$\Delta l = l' - l = \begin{cases} +1 & P\text{-Zweig} \\ 0 & Q\text{-Zweig}\,. \\ -1 & R\text{-Zweig} \end{cases} \tag{4}$$

Der $P$-Zweig liefert die Wellenzahlen

$$\left(\frac{1}{\lambda}\right)_{\mathrm{Rot}P} = \frac{\hbar}{4\pi c}\left[\left(\frac{1}{I} + \frac{1}{I'}\right) l + \left(\frac{1}{I} - \frac{1}{I'}\right)(l+1)^2\right], \tag{5}$$

der $Q$-Zweig

$$\left(\frac{1}{\lambda}\right)_{\mathrm{Rot}Q} = \frac{\hbar}{4\pi c}\left(\frac{1}{I} - \frac{1}{I'}\right) l(l+1), \tag{6}$$

der $R$-Zweig

$$\left(\frac{1}{\lambda}\right)_{\mathrm{Rot}R} = \frac{\hbar}{4\pi c}\left[\left(\frac{1}{I} + \frac{1}{I'}\right)(l+1) + \left(\frac{1}{I} - \frac{1}{I'}\right)(l+1)^2\right]. \tag{7}$$

Die größten Wellenzahlen ergeben sich hiernach für den $R$-Zweig. Ihr Maximum liefert den Bandenkopf des $R$-Zweiges. Er wird für

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}l}\left(\frac{1}{\lambda}\right)_{\mathrm{Rot}R} = 0, \tag{8}$$

d. h. für

$$l = l_R = \frac{3I - I'}{2(I' - I)} \tag{9}$$

angenommen. Für den Bandenkopf des $Q$-Zweiges erhält man aus (6)

$$l_Q = -\frac{1}{2}; \tag{10}$$

dieser ist somit aus einer Häufung der Spektrallinien nicht nachzuweisen. Der Bandenkopf des $P$-Zweiges liegt nach (5) bei

$$l = l_P = -\frac{I + I'}{2(I' - I)}. \tag{11}$$

Zwischen $l_R$ und $l_P$ besteht nach (9) und (11) die Verknüpfung

$$l_P = -(l_R + 1). \tag{12}$$

Im Falle $I' > I$ ist somit nur $l_R$ positiv und aus der Häufung der Spektrallinien zu messen. Die übrigen Bandenköpfe liefern zur Strukturanalyse keine Angaben.
Bildet man für gleiche Werte der Rotationsquantenzahl $l$ die Differenz $\Delta$ nach (1), so ergibt sich nach (5), (6) und (7)

$$\Delta = \left[\left(\frac{1}{\lambda}\right)_R - \left(\frac{1}{\lambda}\right)_Q\right] - \left[\left(\frac{1}{\lambda}\right)_Q - \left(\frac{1}{\lambda}\right)_P\right] = \frac{\hbar}{2\pi c}\,\frac{1}{I'}. \tag{13}$$

(11) und (13) liefern die erforderlichen Gleichungen zur Bestimmung des Trägheitsmomentes $I$ vor und $I'$ nach dem Elektronensprung.

Mit den vorgegebenen Werten erhalten wir aus (13) durch Auflösen nach $I'$

$$I' = \frac{6{,}626 \cdot 10^{-34}}{4\pi^2 \cdot 3 \cdot 10^8 \cdot 5280} \text{ kg m}^2 = 1{,}060 \cdot 10^{-47} \text{ kg m}^2.$$

Für $I$ folgt aus (9)

$$I = \frac{2l_R + 1}{2l_R + 3} I' = \frac{27{,}4}{29{,}4} \cdot 1{,}060 \cdot 10^{-47} \text{ kg m}^2 = 0{,}988 \cdot 10^{-47} \text{ kg m}^2.$$

### 7.2.4. Zweige des Raman-Spektrums infolge der Molekülrotation

Monochromatisches Licht wird nach Bild 7.1.1 auf Formaldehyd $H_2CO$ gerichtet und die Wellenlängenverschiebung auf Grund des Smekal-Raman-Effektes beobachtet. Im Spektrum werden die folgenden Wellenzahlverschiebungen $\Delta \frac{1}{\lambda}$ gemessen:

$$56{,}4 \text{ cm}^{-1}, \quad 94{,}0 \text{ cm}^{-1}, \quad 131{,}6 \text{ cm}^{-1}, \quad 169{,}2 \text{ cm}^{-1}, \ldots$$

Deuten Sie den Effekt und berechnen Sie das Trägheitsmoment des Moleküls. Die Änderung des Trägheitsmomentes bei den Quantenübergängen ist zu vernachlässigen.

**Lösung:**

Das Erregerlicht hebt das Molekül auf ein Zwischenniveau. Dabei ändert sich die Rotationsquantenzahl um $\pm 1$. Bei der Wiederausstrahlung des Lichtes tritt ebenfalls eine Änderung der Rotationsquantenzahl um $\pm 1$ auf. Für die Änderung der Rotationsquantenzahl beim Smekal-Raman-Effekt ergeben sich damit folgende Auswahlregeln:

$$\Delta l = \begin{cases} -2 & P\text{-Zweig} \\ 0 & Q\text{-Zweig} \\ +2 & R\text{-Zweig} \end{cases} \tag{1}$$

Nach (7.2./1), (7.2./2) und (7.2./5) erhält man für die Änderung der Energie bei einem Elektronenübergang

$$\Delta W = \Delta W_{\text{el}} + \Delta W_{\text{osz}} + \Delta W_{\text{rot}}.$$

Die Rotationsenergie ändert sich im $P$-Zweig um

$$\Delta W_P = \frac{\hbar^2}{2I}\left[\left(l - \frac{3}{2}\right)^2 - \left(l + \frac{1}{2}\right)^2\right] = -\frac{\hbar^2}{I}(2l - 1) \qquad (l = 2, 3, \ldots), \tag{2}$$

bleibt im $Q$-Zweig konstant und ändert sich im $R$-Zweig um

$$\Delta W_R = \frac{\hbar^2}{2I}\left[\left(l + \frac{5}{2}\right)^2 - \left(l + \frac{1}{2}\right)^2\right] = \frac{\hbar^2}{I}(2l + 3) \qquad (l = 0, 1, 2, \ldots). \tag{3}$$

Daraus erhält man für die Rotationsanteile

$$\left(\frac{1}{\lambda}\right)_P = -B(4l - 2) \qquad (l = 2, 3, \ldots), \tag{4}$$

$$\left(\frac{1}{\lambda}\right)_Q = 0, \tag{5}$$

$$\left(\frac{1}{\lambda}\right)_R = B(4l + 6). \qquad (l = 0, 1, 2, \ldots). \tag{6}$$

Es ergeben sich somit die Linien nach Tab. 7.2.1.

Der $Q$-Zweig entspricht im vorliegenden Fall dem Licht, das durch die Rotation keine Verschiebung erfährt. Für den Abstand der beiden benachbarten Linien des $P$- und des $R$-Zweiges folgt

$$\left(\Delta \frac{1}{\lambda}\right)_{\pm 6B} = 12B = 2 \cdot 56{,}4 \cdot 10^2 \text{ m}^{-1}.$$

Für $B$ erhält man somit

$$B = 940 \text{ m}^{-1},$$

woraus nach (7.2.1./3) das Trägheitsmoment für die betreffende Rotationsachse bestimmt werden kann.



## Aufgaben

A 7.2.1. Für das $H_2O$-Molekül werden als Abstände der äquidistanten Linien des IR-Spektrums $\frac{1}{\lambda} = 55{,}58 \text{ cm}^{-1}, 29{,}00 \text{ cm}^{-1}, 18{,}58 \text{ cm}^{-1}$ gemessen. Berechnen Sie daraus die drei Rotationskonstanten.

A 7.2.2. Im IR-Spektrum des Fluorwasserstoffs wird als Wellenlängenabstand der beiden benachbarten Absorptionsmaxima des $P$- und des $R$-Zweiges die Größe $41{,}76 \text{ cm}^{-1}$ gemessen. Berechnen Sie daraus das Trägheitsmoment des Moleküls und den Kernabstand der beiden Atome.

A 7.2.3. Im Absorptionsspektrum des Bromwasserstoffs treten Maxima beiderseits einer Lücke bei den Wellenzahlen $2{,}65 \cdot 10^3 \text{ cm}^{-1}$ auf. Die Differenz der Wellenzahlen zwischen den benachbarten Absorptionsmaxima beträgt $33{,}42 \text{ cm}^{-1}$. Berechnen Sie daraus die Frequenz der Oszillationsschwingung, das Trägheitsmoment und den Kernabstand.

A 7.2.4. Im IR-Spektrum des Kohlenmonoxids treten, durch eine Lücke der Breite $7{,}6 \text{ cm}^{-1}$ des Wellenzahlbereiches getrennt, in gleichmäßigen Abständen Maxima auf. Sie gruppieren sich um den Punkt $\frac{1}{\lambda} = 216{,}92 \text{ cm}^{-1}$ des Spektrums. Berechnen Sie daraus die Eigenfrequenz der Oszillationsschwingung des CO-Moleküls, das Trägheitsmoment und den Kernabstand.

A 7.2.5. Berechnen Sie den Wellenzahlabstand der Absorptionsmaxima des CO-Moleküls auf Grund der Meßergebnisse nach A 7.2.4.

A 7.2.6. Wie groß sind nach dem Modell des CO-Moleküls als rotierendem Oszillator das Rotations- und das Oszillationsquant beim Übergang aus dem Grundzustand?

A 7.2.7. IR-Spektren treten nur bei Bewegungen auf, die mit einer Änderung des elektrischen Dipolmomentes verknüpft sind. Untersuchen Sie auf Grund dessen das Auftreten von IR-Spektren bei zweiatomigen Molekülen.

A 7.2.8. Die erste und die zweite Linie des $Q$-Zweiges im FORTRAT-Diagramm für Jodwasserstoff weisen den Abstand $0{,}462 \text{ cm}^{-1}$ auf. Als Abstand der Wellenzahlen gleicher Rotationsquantenzahl $l$ des $R$- und des $P$-Zweiges ergibt sich $12{,}724 \text{ cm}^{-1}$. Berechnen Sie daraus das Trägheitsmoment vor und nach dem Quantensprung.

A 7.2.9. Im FORTRAT-Diagramm für AlH tritt der Bandenkopf des $R$-Zweiges für $l = 4{,}1$ auf. Die beiden Linien für $l = 0$ des $R$- und des $Q$-Zweiges haben voneinander den Abstand $9{,}3 \text{ cm}^{-1}$. Berechnen Sie das Trägheitsmoment vor und nach dem Quantenübergang.

A 7.2.10. Im RAMAN-Spektrum des Wasserstoffmoleküls werden Linien mit den folgenden Wellenzahldifferenzen (in $\text{cm}^{-1}$) gegen das Zentrum gemessen: $\pm 790$, $\pm 564$, $\pm 339$. Berechnen Sie daraus den Abstand der beiden Kerne.

## 7.3. Auswahlregeln für Schwingungsübergänge in symmetrischen Molekülen

### E Einführung

*Unbestimmtes Produkt zweier Vektoren*

Das unbestimmte Produkt $\boldsymbol{A} \circ \boldsymbol{B}$ zweier Vektoren $\boldsymbol{A}$ und $\boldsymbol{B}$ stellt einen Tensor zweiter Stufe dar: Die skalare Multiplikation von links mit $\boldsymbol{C}$ ergibt

$$\boldsymbol{C} \cdot \boldsymbol{A} \circ \boldsymbol{B} = m\boldsymbol{B}$$

mit dem Skalarprodukt $m = \boldsymbol{C} \cdot \boldsymbol{A}$, die von rechts

$$\boldsymbol{A} \circ \boldsymbol{B} \cdot \boldsymbol{C} = n\boldsymbol{A}$$

mit dem Skalarprodukt $n = \boldsymbol{B} \cdot \boldsymbol{C}$.
Für zweidimensionale Vektoren $\boldsymbol{A} = a_1\boldsymbol{i} + a_2\boldsymbol{j}$ und $\boldsymbol{B} = b_1\boldsymbol{i} + b_2\boldsymbol{j}$ erhält man als unbestimmtes Produkt

$$\boldsymbol{A} \circ \boldsymbol{B} = a_1b_1\boldsymbol{i} \circ \boldsymbol{i} + a_1b_2\boldsymbol{i} \circ \boldsymbol{j} + a_2b_1\boldsymbol{j} \circ \boldsymbol{i} + a_2b_2\boldsymbol{j} \circ \boldsymbol{j},$$

wofür man den Tensor

$$\boldsymbol{A} \circ \boldsymbol{B} = \begin{pmatrix} a_1b_1 & a_1b_2 \\ a_2b_1 & a_2b_2 \end{pmatrix}$$

schreiben kann.

*Multiplikation von Symmetrierassen*

Bezeichnen die Vektoren $\boldsymbol{b}_{11}, \ldots, \boldsymbol{b}_{1n}$ eine Basis des Vektorraumes $V_1$; $\boldsymbol{b}_{21}, \ldots, \boldsymbol{b}_{2m}$ eine des Vektorraumes $V_2$, so definieren die unbestimmten Produkte

$$\boldsymbol{b}_{1i} \circ \boldsymbol{b}_{2j} \qquad (i = 1, \ldots, n;\ j = 1, \ldots, m) \tag{1}$$

die Basis des als Tensorprodukt

$$V = V_1 \circ V_2 \tag{2}$$

bezeichneten Vektorraumes $V$. Er enthält die Gesamtheit aller Linearkombinationen

$$\sum_{i,j} z_{ij}\boldsymbol{b}_{1i} \circ \boldsymbol{b}_{2j}. \tag{3}$$

Als Tensorprodukt der Schwingungsvektoren

$$\boldsymbol{X} = \sum_i x_i\boldsymbol{b}_{1i} \tag{4}$$

aus $V_1$ und

$$\boldsymbol{Y} = \sum_j y_j\boldsymbol{b}_{2j} \tag{5}$$

aus $V_2$ definiert man die Summe der unbestimmten Produkte

$$\boldsymbol{X} \circ \boldsymbol{Y} = \sum_{i,j} x_i y_j \boldsymbol{b}_{1i} \circ \boldsymbol{b}_{2j}. \tag{6}$$

Für die lineare Symmetrieoperation $\sigma$ legt man fest:

$$\sigma \sum_{i,j} z_{ij} \boldsymbol{b}_{1i} \circ \boldsymbol{b}_{2j} = \sum_{i,j} z_{ij} \sigma b_{1i} \circ \sigma b_{2j}. \tag{7}$$

Sind $V_1$ und $V_2$ $G$-Vektorräume gemäß 6.3., so folgt nach (7)

$$\begin{aligned} \sigma_2\sigma_1\boldsymbol{X} \circ \boldsymbol{Y} &= \sigma_2\sigma_1\boldsymbol{X} \circ \sigma_2\sigma_1\boldsymbol{Y} = \sigma_2(\sigma_1\boldsymbol{X}) \circ \sigma_2(\sigma_1\boldsymbol{Y}) \\ &= \sigma_2[(\sigma_1\boldsymbol{X}) \circ (\sigma_1\boldsymbol{Y})] = \sigma_2(\sigma_1\boldsymbol{X} \circ \boldsymbol{Y}). \end{aligned} \tag{8}$$

Das unbestimmte Produkt $\boldsymbol{X} \circ \boldsymbol{Y}$ verhält sich somit bezüglich der Anwendung einer linearen Symmetrieoperation $\sigma$ wie der Vektor aus einem $G$-Raum. Auch $\boldsymbol{X} \circ \boldsymbol{Y}$ kann demzufolge als $G$-Vektorraum behandelt werden.
Die Anwendung von $\sigma$ auf $\boldsymbol{b}_{1i}$ und $\boldsymbol{b}_{2j}$ ergebe

$$\sigma \boldsymbol{b}_{1i} = \sum_{k=1}^{n} a_{1ik}(\sigma)\, \boldsymbol{b}_{1ik}, \qquad \sigma \boldsymbol{b}_{2j} = \sum_{l=1}^{m} a_{2jl}(\sigma)\, \boldsymbol{b}_{2jl}.$$

Damit folgt für die Spuren der Symmetrieoperation $\sigma$ in $V_1$ und in $V_2$

$$sp_{V_1}\sigma = \sum_{i=1}^{n} a_{1ii}, \qquad sp_{V_2}\sigma = \sum_{j=1}^{m} a_{2jj}. \tag{9}$$

Wegen

$$\sigma(\boldsymbol{b}_{1i} \circ \boldsymbol{b}_{2j}) = \sum_{k=1}^{n} a_{1ik}\boldsymbol{b}_{1ik} \circ \sum_{l=1}^{m} a_{2jl}\boldsymbol{b}_{2jl} = \sum_{k,l} a_{1ik}a_{2jl}\boldsymbol{b}_{1ik} \circ \boldsymbol{b}_{2jl} \tag{10}$$

erhält man daraus

$$\boxed{sp_{V_1 \circ V_2}\sigma = sp_{V_1}\sigma \cdot sp_{V_2}\sigma}. \tag{11}$$

Ist somit die Symmetrierasse von $\boldsymbol{X}$ aus $V_1$ und die von $\boldsymbol{Y}$ aus $V_2$ bekannt, so kann auch die Symmetrierasse des Tensors $\boldsymbol{X} \circ \boldsymbol{Y}$ bestimmt werden. In (11) gilt dabei das kommutative Gesetz.
Die Gesamtheit der Spuren einer Symmetrieoperation bei der Tensormultiplikation wird im folgenden durch das Symbol $\chi(\pi_i)$ bezeichnet. Die Symmetrierasse, für die sämtliche Spuren $\chi$ der Symmetrieoperationen eins sind, heißt **totalsymmetrische** Symmetrierasse und wird stets durch $\pi_1$ dargestellt.

**Beispiel 7.3.1. Tensormultiplikation der Symmetrierassen**

Nach der Charaktertafel für die Symmetriegruppe $C_{4v}$ folgt

| | **1** | $2C_4$ | $C_2$ | $2\sigma_v$ | $2\sigma_d$ |
|---|---|---|---|---|---|
| $\chi(A_2)$ | 1 | 1 | 1 | −1 | −1 |
| $\chi(B_2)$ | 1 | −1 | 1 | −1 | 1 |

Es ist $\chi(A_2) \circ \chi(B_2)$ gleich $\chi(B_1)$:

| | | | | | |
|---|---|---|---|---|---|
| $\chi(B_1)$ | 1 | −1 | 1 | 1 | −1 |

Die Tensoren $\boldsymbol{X}(A_2) \circ \boldsymbol{Y}(B_2)$ gehören daher der Symmetrierasse $B_1$ an, und man schreibt

$$\chi(B_1) = \chi(A_2) \circ \chi(B_2) \qquad \text{bzw.} \qquad B_1 = A_2 \circ B_2 .$$

*Tafel der Tensorprodukte*

Bei der Multiplikation von Symmetrierassen ergeben sich folgende Gesetzmäßigkeiten:

Die Multiplikation einer beliebigen Symmetrierasse $\pi_i$ mit der totalsymmetrischen $\pi_1$ ergibt die Ausgangsrasse $\pi_i$.
Bei der Multiplikation **nichtentarteter** Rassen gilt

$$A \circ A = A, \quad B \circ B = A, \quad B \circ A = B, \quad A \circ B = B. \tag{12}$$

Für Rassen, die mit g oder u, ′ oder ″ gekennzeichnet sind, erhält man

$$\left.\begin{array}{l} \mathrm{g} \circ \mathrm{g} = \mathrm{g}, \quad \mathrm{u} \circ \mathrm{u} = \mathrm{g}, \quad \mathrm{g} \circ \mathrm{u} = \mathrm{u}, \quad \mathrm{u} \circ \mathrm{g} = \mathrm{u}; \\ (') \circ (') = ('), \quad ('') \circ ('') = ('), \quad ('') \circ (') = (''), \quad (') \circ ('') = (''). \end{array}\right\} \tag{13}$$

Die Multiplikation einer **entarteten** mit einer nichtentarteten Symmetrierasse ergibt eine entartete. Die Multiplikation zweifach entarter Symmetrierassen läßt sich als Linearkombination aller Charaktere der Symmetriegruppe darstellen:

$$sp_{E_1 \circ E_2} = \sum n_i \chi_i . \tag{14}$$

In Tab. 7.3.1 sind die Charaktere der Symmetriegruppe $D_{6\mathrm{h}}$, in Tab. 7.3.2 die Tensorprodukte der Symmetriegruppe $D_{6\mathrm{h}}$ als Multiplikationstabelle zusammengestellt.

*Einstein-Gleichung*

Bei der Emission und Absorption elektromagnetischer Strahlung treten die elektrischen oder die magnetischen Komponenten mit dem Molekül in Wechselwirkung. Sie ist mit der elektrischen Komponente um einen Faktor der Größenordnung $10^5$ größer als mit der magnetischen Komponente. Maßgeblich für Quantenübergänge ist daher das vom elektrischen Feld im Molekül erzeugte elektrische Dipolmoment $\boldsymbol{m}_\mathrm{e} = \boldsymbol{m}_{\mathrm{e}0} \times \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega t}$. $\psi'$ bezeichne die Wellenfunktion vor, $\psi''$ die nach dem Quantenübergang.
Nach A. Einstein ist die Intensität der Spektrallinie dem Quadrat des Übergangsmomentes $\boldsymbol{p}_0$ zwischen den beiden Quantenzuständen $\psi'$ und $\psi''$ proportional und dieses durch

$$\boldsymbol{p}_0 = \int \psi'^* \boldsymbol{m}_{\mathrm{e}0} \psi'' \,\mathrm{d}V \tag{15}$$

gegeben. Die Integration erfolgt über den gesamten Raum.
Der Übergang $\psi' - \psi''(\psi' \to \psi'', \psi'' \to \psi')$ ist erlaubt, wenn (15) von Null verschieden ist. Verschwindet dagegen (15) für sämtliche Komponenten von $\boldsymbol{m}_{\mathrm{e}0}$, so tritt die Spektrallinie nicht auf.
Bei symmetrischen Molekülen sind die Wellenfunktionen symmetrisch. Schwingungsrassen, die bei Symmetrieoperationen negative oder komplexe Charaktere enthalten, liefern bei der Integration über den gesamten Raum keinen Beitrag, da sich die eizelnen Anteile herausheben. Damit (15) von Null verschieden ist, muß daher der

Integrand totalsymmetrisch sein oder die totalsymmetrische Schwingungsrasse enthalten:

$$\chi(\psi') \circ \chi(\boldsymbol{m}_{e0}) \circ \chi(\psi'') = \chi(\pi_1), \tag{16}$$

$$\chi(\psi') \circ \chi(\boldsymbol{m}_{e0}) \circ \chi(\psi'') \supset \chi(\pi_1). \tag{17}$$

(17) gilt für Übergänge zwischen entarteten Zuständen, bei denen nach Beispiel 7.3.2 mehrere Schwingungszustände auftreten. (16) und (17) enthalten keine Aussage über die Intensität. Auch wenn (16) oder (17) erfüllt sind, besteht die Möglichkeit, daß die betreffende Linie nicht beobachtet wird. Der Grund hierfür kann z. B. in ihrer schwachen Intensität liegen. Dagegen ist die Nichterfüllung von (16) bzw. (17) für das Nichtauftreten der betreffenden Linie hinreichend.



## Probleme

### 7.3.1. Permanentes elektrisches Moment eines Moleküls

Bestimmen Sie die Symmetriegruppen der Moleküle, die auf Grund ihrer Struktur ein permanentes elektrisches Moment haben können.

**Lösung:**

Bezeichnet $q_i$ die Ladung des $i$-ten Massenpunktes, $\boldsymbol{r}_i(x_i, y_i, z_i)$ seinen Ortsvektor, so sind die Komponenten des elektrischen Momentes eines Moleküls durch

$$m_{ex} = \sum_i q_i x_i, \qquad m_{ey} = \sum_i q_i y_i, \qquad m_{ez} = \sum_i q_i z_i \tag{1}$$

gegeben. Für

$$m_{ex} = m_{ey} = m_{ez} = 0 \tag{2}$$

besitzt das Molekül kein permanentes elektrisches Moment.
Der Vektor eines permanenten Dipolmomentes $\boldsymbol{m}_e$ muß gegenüber beliebigen Symmetrieoperationen invariant sein, d. h. der totalsymmetrischen Symmetrierasse $\pi_1$ angehören.
$\boldsymbol{m}_e$ und der Translationsvektor $\boldsymbol{T}$ stellen Verschiebungsvektoren dar. Die Komponenten $m_{ex}$, $m_{ey}$, $m_{ez}$ eines elektrischen Momentes transformieren sich daher bei Symmetrieoperationen wie die Translationskomponenten $T_x$, $T_y$, $T_z$ des Moleküls:

$$\boxed{\chi(m_{ex}) = \chi(T_x), \qquad \chi(m_{ey}) = \chi(T_y), \qquad \chi(m_{ez}) = \chi(T_z)}\,. \tag{3}$$

Auf Grund dessen sind die Komponenten des Dipolmomentes genau dann von Null verschieden, wenn die Punktgruppe eine Translationskomponente in der totalsymmetrischen Schwingungsrasse $\pi_1$ enthält. Nach den Charaktertafeln enthalten nur die Punktgruppen $C_n$ und $C_{nv}$ Translationen der totalsymmetrischen Schwingungsrasse. Nur Moleküle dieser Symmetriegruppen können ein permanentes elektrisches Moment aufweisen.

### 7.3.2. Übergänge zwischen nichtentarteten Zuständen in der IR-Spektroskopie

Die Komponenten des elektrischen Dipolmomentes verhalten sich bei Symmetrieoperationen nach (7.3.1./3) wie die Komponenten der Translation. Untersuchen Sie auf Grund dessen, welche Übergänge zwischen nichtentarteten Schwingungszuständen erlaubt sind, welcher Schwingungsrasse die Schwingung angehört und wie sie polarisiert ist.

Welche Übergänge sind für Moleküle der Punktgruppe $C_{2h}$ in den Grundzustand erlaubt, welche Übergänge unter Beteiligung des Schwingungszustandes $B_u$, und wie sind sie polarisiert? Wie groß ist die Anzahl der Infrarotlinien infolge von Schwingungsübergängen beim Glyoxalmolekül (Äthandial; vgl. Bild 7.3.1)?

Bild 7.3.1. Struktur des Glyoxalmoleküls $(COH)_2$

**Lösung:**

Die Bedingung (7.3./16) kann wegen der Gleichwertigkeit von Translationsvektor $\boldsymbol{T}$ und elektrischem Moment $\boldsymbol{m}_e$ durch

$$\chi(\psi') \circ \chi(\boldsymbol{T}) \circ \chi(\psi'') = \chi(\pi_1) \tag{1}$$

ersetzt werden. (1) steht für die folgenden Bedingungen:

$$\chi(\psi') \circ \chi(T_x) \circ \chi(\psi'') = \chi(\pi_1) \tag{2a}$$

und/oder $$\chi(\psi') \circ \chi(T_y) \circ \chi(\psi'') = \chi(\pi_1) \tag{2b}$$

und/oder $$\chi(\psi') \circ \chi(T_z) \circ \chi(\psi'') = \chi(\pi_1). \tag{2c}$$

„und/oder“ bedeutet, daß mindestens eine der drei Bedingungen (2) erfüllt sein muß.
Wenn der Endzustand mit dem energetischen Grundzustand, dem totalsymmetrischen Zustand $\pi_1$, übereinstimmt, ist $\chi(\psi'') = \chi(\pi_1)$. Die Charaktere von $\pi_1$ sind sämtlich 1. Man kann daher (2) ersetzen durch

$$\chi(\psi') \circ \chi(T_x) = \chi(\pi_1) \tag{3a}$$

und/oder $$\chi(\psi') \circ \chi(T_y) = \chi(\pi_1) \tag{3b}$$

und/oder $$\chi(\psi') \circ \chi(T_z) = \chi(\pi_1) \tag{3c}$$

bzw.

$$\boxed{\chi(\psi') = \chi(T_x) \quad \text{und/oder} \quad \chi(\psi') = \chi(T_y) \quad \text{und/oder} \quad \chi(\psi') = \chi(T_z)}\,. \tag{4}$$

Übergänge aus oder in den totalsymmetrischen Zustand sind erlaubt, wenn die Symmetrierasse des zweiten die einer Translation ist. Nach der Charaktertafel enthalten bei der Gruppe $C_{2h}$ die Rassen $A_u$ und $B_u$ Translationskomponenten. Die erlaubten Übergänge in den Grundzustand sind daher

$$\left.\begin{array}{lll} A_u \to A_g & \text{mit} & A_u \circ A_g = A_u(E_z), \\ B_u \to A_g & \text{mit} & B_u \circ A_g = B_u(E_x, E_y). \end{array}\right\} \tag{5}$$

Für die Übergänge unter Beteiligung von $B_u$ erhält man nach (1)

$$\chi(\psi') \circ \chi(\boldsymbol{T}) \circ \chi(B_u) = \chi(A_g). \tag{6}$$

Diese Bedingung wird für

$$\chi(\psi') \circ \chi(B_u) = \chi(\boldsymbol{T}) \tag{7}$$

erfüllt. Nach der Charaktertafel ergibt sich das folgende Schema:

$\chi(B_u)$ 1 −1 −1 1; das ist identisch mit $\chi(T_x) = \chi(T_y)$.

$\chi(A_g)$ 1 1 1 1 erfüllt (7) mit den Komponenten $E_x$, $E_y$.

Einziger Übergang unter Beteiligung von $B_u$ mit Komponenten $E_x$, $E_y$ ist somit

$$A_g \to B_u \quad \text{mit} \quad A_g \circ B_u = B_u(E_x, E_y). \tag{8}$$

Für die Schwingung in Richtung der $z$-Achse folgt

$$\begin{array}{lrrrr} \chi(B_u) & 1 & -1 & -1 & 1 \\ \chi(T_z) = \chi(A_u) & 1 & 1 & -1 & -1 \end{array}$$

Dazu gehört nach (7)

$$\begin{array}{lrrrr} \chi(B_g) & 1 & -1 & 1 & -1, \end{array}$$

d. h., das in Richtung der $z$-Achse schwingende elektrische Feld entsteht unter Beteiligung von $B_u$ nur durch den Übergang

$$B_g \to B_u \quad \text{mit} \quad B_g \circ B_u = A_u(E_z). \tag{9}$$

Bei Schwingungsübergängen treten in der Regel Spektrallinien im Infrarot auf, die in der Absorption gemessen werden. Die Bedingungen (2) und (7) werden daher als Auswahlregeln der IR- bzw. der Absorptionsspektren bezeichnet.
Bei der Symmetriegruppe $C_{2h}$ ergeben sich IR-aktive Schwingungen nur für die ungeraden Schwingungsrassen $A_u$ und $B_u$. Messung der IR-Linien liefert daher bei Molekülen der Gruppe $C_{2h}$ die Schwingungen der ungeraden Symmetrierassen.
Glyoxal $C_2O_2H_2$ enthält nach 6.3.3. und 6.2.5. in der Symmetrierasse $A_u$ (vgl. Tab. 6.3.1)

$$n'(A_u) = \frac{1}{4}\,[1 \cdot 1 \cdot 12 + 1 \cdot 1 \cdot 2 + 1 \cdot (-1) \cdot 0 + 1 \cdot (-1) \cdot 6] = 2,$$

in der Symmetrierasse $B_u$

$$n'(B_u) = \frac{1}{4}\,[1 \cdot 1 \cdot 12 + 1 \cdot (-1) \cdot 2 + 1 \cdot (-1) \cdot 0 + 1 \cdot 1 \cdot 6] = 4$$

eigentliche Schwingungen. Jede dieser Schwingungen kann im IR-Spektrum beobachtet werden. Glyoxal enthält somit infolge von Schwingungsübergängen sechs IR-Linien.

### 7.3.3. Elektronen- und IR-Übergänge zwischen entarteten Zuständen

Untersuchen Sie für Moleküle der Punktgruppe $D_{6h}$, welche Elektronen- und Schwingungsübergänge zwischen den Schwingungsrassen erlaubt und wie diese polarisiert sind. Wie groß ist die Anzahl der IR-Spektrallinien infolge von Schwingungsübergängen beim Benzolmolekül?

**Lösung:**

Ist der Grundzustand $\pi_1$ an einem Übergang beteiligt, so folgt wegen $\chi(\psi'') = \chi(\pi_1)$ aus (7.3./17)

$$\chi(\psi') \circ \chi(\boldsymbol{T}) \supset \chi(\pi_1), \tag{1}$$

wofür man

$$\boxed{\chi(\psi') \supset \chi(T_x) \quad \text{und/oder} \quad \chi(T_y) \quad \text{und/oder} \quad \chi(T_z)} \tag{2}$$

schreiben kann.

Bei Übergängen zwischen angeregten Zuständen ergibt sich aus (7.3./17)

$$\boxed{\chi(\psi') \circ \chi(\psi'') \supset \chi(T_x) \quad \text{und/oder} \quad \chi(T_y) \quad \text{und/oder} \quad \chi(T_z)}\,. \tag{3}$$

Im vorliegenden Fall folgt aus der Charaktertafel

$$\chi(T_x) = \chi(T_y) = \chi(E_{1u}), \tag{4}$$

$$\chi(T_z) = \chi(A_{2u}). \tag{5}$$

Nach (2) und (4) erhält man für Übergänge in den Grundzustand

$$A_{1g} \to E_{1u} \quad \text{mit} \quad A_{1g} \circ E_{1u} = E_{1u}(E_x, E_y), \tag{6}$$

$$A_{1g} \to A_{2u} \quad \text{mit} \quad A_{1g} \circ A_{2u} = A_{2u}(E_z). \tag{7}$$

(3), (4) und (5) fordern nach der Charaktertafel für Übergänge zwischen angeregten Zuständen

$$\chi(\psi') \circ \chi(\psi'') \supset E_{1u}(T_x, T_y) \quad \text{und/oder} \quad A_{2u}(T_z). \tag{8}$$

Nach der Multiplikationstafel Tabelle 7.3.2 ist das für folgende Übergänge erfüllt:

$$\left.\begin{array}{l} A_{2g} \to E_{1u},\ B_{1g} \to E_{2u},\ B_{2g} \to E_{1u},\ E_{1g} \to A_{1u},\ E_{1g} \to A_{2u},\ E_{1g} \to E_{2u}, \\ E_{2g} \to B_{1u},\ E_{2g} \to B_{2u},\ E_{2g} \to E_{1u} \end{array}\right\} \tag{9}$$

mit Schwingung des elektrischen Vektors in der $x, y$-Ebene, d. h. senkrecht zur Hauptachse, sowie

$$A_{2g} \to A_{1u},\ B_{1g} \to B_{2u},\ B_{2g} \to B_{1u},\ E_{1g} \to E_{1u},\ E_{2g} \to E_{2u} \tag{10}$$

mit Schwingung des elektrischen Vektors in Richtung der Hauptdrehachse. Nach 6.3.3. erhält man in der Gruppe $D_{6h}$ bei den Symmetrierassen $E_{1u}$ und $A_{2u}$ für $C_6H_6$ die in Tab. 7.3.3 zusammengestellten Größen für die Anzahl $n_k$ der Dimensionen, die Anzahl $n_k'$ der Dimensionen eigentlicher Schwingungen, die Anzahl $N_k' = \frac{n_k'}{g}$ der Frequenzen dieser Symmetrierasse (gleich Anzahl der infraroten Spektrallinien).
Benzol weist danach vier IR-Linien infolge von Schwingungsübergängen auf.

### 7.3.4. Auswahlregeln für den Raman-Effekt bei einer nichtentarteten Symmetrierasse

Bei der RAMAN-Streuung werden die Übergangsregeln durch die Eigenschaften des Tensors der Polarisierbarkeit $\alpha$ bestimmt. Dieser ist durch

$$\boldsymbol{m}_e = \alpha \boldsymbol{E}, \qquad \alpha = \begin{pmatrix} \alpha_{xx} & \alpha_{xy} & \alpha_{xz} \\ \alpha_{yx} & \alpha_{yy} & \alpha_{yz} \\ \alpha_{zx} & \alpha_{zy} & \alpha_{zz} \end{pmatrix} \tag{1}$$

definiert. Darin bedeutet $\boldsymbol{E} = \boldsymbol{E}_0\, e^{-i\omega t}$ die elektrische Feldstärke der äußeren Strahlung, $\boldsymbol{m}_e = \boldsymbol{m}_{e0}\, e^{-i\omega t}$ das induzierte Dipolmoment.
Stellen Sie danach die Auswahlregeln für die Quantenübergänge der RAMAN-Streuung auf.
Welche Auswahlregeln ergeben sich für das Glyoxalmolekül, das der Symmetriegruppe $C_{2h}$ angehört, a) beim Übergang in den Grundzustand, b) bei einem Übergang unter Beteiligung der Symmetrierasse $B_1$?
Bestimmen Sie die Anzahl der RAMAN-Linien, die beim Glyoxal (Äthandial; vgl. Bild 7.3.1) zu beobachten sind.

**Lösung:**

Wir zerlegen das nach (7.3./15) für die Übergangswahrscheinlichkeit maßgebliche Übergangsmoment

$$p_0 = \int \psi'^* \boldsymbol{m}_{e0} \psi'' \, \mathrm{d}V \tag{2}$$

mittels (1) in seine Komponenten. Es folgt

$$p_{0x} = E_{0x} \int \psi'^* \alpha_{xx} \psi'' \, \mathrm{d}V + E_{0y} \int \psi'^* \alpha_{xy} \psi'' \, \mathrm{d}V + E_{0z} \int \psi'^* \alpha_{xz} \psi'' \, \mathrm{d}V, \tag{2a}$$

$$p_{0y} = E_{0x} \int \psi'^* \alpha_{yx} \psi'' \, \mathrm{d}V + E_{0y} \int \psi'^* \alpha_{yy} \psi'' \, \mathrm{d}V + E_{0z} \int \psi'^* \alpha_{yz} \psi'' \, \mathrm{d}V, \tag{2b}$$

$$p_{0z} = E_{0x} \int \psi'^* \alpha_{zx} \psi'' \, \mathrm{d}V + E_{0y} \int \psi'^* \alpha_{zy} \psi'' \, \mathrm{d}V + E_{0z} \int \psi'^* \alpha_{zz} \psi'' \, \mathrm{d}V. \tag{2c}$$

Soll $p_0^2 > 0$, d. h. der Übergang $\psi' \to \psi''$ erlaubt sein, so muß eins der Integrale in (2a) bis (2c) von Null verschieden sein. Hierzu ist nach (7.3./16) bei Übergängen zwischen nichtentarteten Symmetrierassen erforderlich, daß das Tensorprodukt totalsymmetrisch ist:

$$\boxed{\chi(\psi') \circ \chi(\alpha_{ik}) \circ \chi(\psi'') = \chi(\pi_1)}\,. \tag{3}$$

$\alpha_{ik}$ bedeutet eins der neun Elemente des Polarisierbarkeitstensors $\alpha$.
Die Komponenten des elektrischen Dipolmomentes $\boldsymbol{m}_e$ transformieren sich bei Symmetrieoperationen nach (7.3.1./3) wie die Komponenten des Translationsvektors $\boldsymbol{T}$:

$$\chi(m_{ei}) = \chi(T_i)\,. \tag{4}$$

Bei der Beobachtung mit linear polarisiertem Licht schwinge der elektrische Vektor in der Richtung $\boldsymbol{k}$, es sei also $\boldsymbol{E} = (0, 0, E_k)$. Da $\boldsymbol{E}$ ebenso wie $\boldsymbol{T}$ einen Verschiebungsvektor darstellt, transformiert sich $E_k$ bei Symmetrieoperationen wie $T_k$:

$$\chi(E_k) = \chi(T_k)\,. \tag{5}$$

Andererseits folgt aus (1) für die Komponenten des Dipolmomentes in einem Cartesischen Koordinatensystem

$$m_{ei} = \alpha_{ik} E_k \qquad (i, j, k = x, y, z) \tag{6}$$

und daher

$$\chi(\alpha_{ik} E_k) = \chi(T_i)\,. \tag{7}$$

Hieraus ergibt sich wegen $\chi(T_k) \circ \chi(T_k) = \chi(\pi_1)$ für nichtentartete Symmetrierassen

$$\boxed{\chi(\alpha_{ik}) = \chi(T_i) \circ \chi(T_k)}\,. \tag{8}$$

Bei Übergängen in den Grundzustand ist $\chi(\psi'') = \chi(\pi_1)$. Damit folgt aus (3)

$$\chi(\psi') = \chi(\alpha_{ik}) = \chi(T_i) \circ \chi(T_k)\,. \tag{9}$$

Übergänge, an denen der totalsymmetrische Grundzustand nicht beteiligt ist, sind dagegen durch

$$\chi(\psi') \circ \chi(\psi'') = \chi(\alpha_{ik}) = \chi(T_i) \circ \chi(T_k) \tag{10}$$

gekennzeichnet.
Wie ein Vergleich mit (7.3.2./4) und (7.3.2./7) zeigt, kann die RAMAN-Streuung als Aufeinanderfolge zweier Übergänge angesehen werden, die nach den für das Dipolmoment gültigen Regeln erfolgen: Der erste Übergang führt vom Ausgangszustand in einen virtuellen, der zweite von dort in den Grundzustand (vgl. 7.2.4.).

Aus (9) und (10) geht hervor, daß bei Punktgruppen mit nichtentarteten Symmetrierassen $\chi(\alpha_{ii}) = \chi(T_i) \circ \chi(T_i) = \chi(\pi_1)$ gilt, d. h. der totalsymmetrischen Punktgruppe $\pi_1$ entspricht. In den Charaktertafeln sind die Symmetrierassen der Koeffizienten $\alpha_{ik}$ unter der Voraussetzung $\alpha_{ik} = \alpha_{ki}$ aufgeführt.
Ein RAMAN-Übergang ist somit nur möglich, wenn der Quantensprung $\psi' \to \psi''$ eine Symmetrierasse ergibt, der auch einer der Koeffizienten $\alpha_{ik}$ angehört. Für die Gruppe $C_{2h}$ entnimmt man der Charaktertafel

$$\begin{aligned}
\chi(\psi') \circ \chi(\psi'') &= \chi(\alpha_{xx}) = \chi(T_x) \circ \chi(T_x) = B_u \circ B_u = A_g,\\
&= \chi(\alpha_{yy}) = \chi(T_y) \circ \chi(T_y) = B_u \circ B_u = A_g,\\
&= \chi(\alpha_{zz}) = \chi(T_z) \circ \chi(T_z) = A_u \circ A_u = A_g;
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\chi(\alpha_{xy}) &= \chi(T_x) \circ \chi(T_y) = B_u \circ B_u = A_g,\\
\chi(\alpha_{xz}) &= \chi(T_x) \circ \chi(T_z) = B_u \circ A_u = B_g,\\
\chi(\alpha_{yz}) &= \chi(T_y) \circ \chi(T_z) = B_u \circ A_u = B_g.
\end{aligned}$$

In der Charaktertafel sind in Übereinstimmung mit unserer Rechnung $A_g$ als Symmetrierasse von $\alpha_{xx}, \alpha_{yy}, \alpha_{zz}, \alpha_{xy}$ und $B_g$ als Symmetrierasse von $\alpha_{xz}, \alpha_{yz}$ aufgeführt. Nur Schwingungen dieser Symmetrierassen können RAMAN-aktiv sein.
Wie man sieht, sind in $C_{2h}$ sämtliche RAMAN-aktiven Schwingungen gerade. Man erhält daher die geraden Schwingungen dieser Punktgruppe, indem man ihre RAMAN-Linien bestimmt. Für die Anzahl der eigentlichen Schwingungen in den Symmetrierassen $A_g$ und $B_g$ erhält man nach 6.3.3. für Glyoxal

$$n'(A_g) = \frac{1}{4}(1 \cdot 1 \cdot 12 + 1 \cdot 1 \cdot 2 + 1 \cdot 1 \cdot 0 + 1 \cdot 1 \cdot 6) = 5,$$

$$n'(B_g) = \frac{1}{4}[1 \cdot 1 \cdot 12 + 1 \cdot (-1) \cdot 2 + 1 \cdot 1 \cdot 0 + 1 \cdot (-1) \cdot 6] = 1.$$

Es sind somit sechs RAMAN-Linien zu beobachten.

### 7.3.5. Raman-Streuung entarteter Symmetrierassen

Bei entarteten Symmetrierassen sind die Richtungen senkrecht zur Hauptdrehachse gleichberechtigt und nicht unterscheidbar. Aus $\boldsymbol{m}_e = \boldsymbol{\alpha E}$ folgt im Falle $E_z = 0$, $E_x \neq 0$ auch $E_y \neq 0$. Man erhält

$$\left.\begin{aligned}
m_{ex} &= \alpha_{xx}E_x + \alpha_{xy}E_y,\\
m_{ey} &= \alpha_{xy}E_x + \alpha_{yy}E_y.
\end{aligned}\right\} \quad (1)$$

Leiten Sie auf Grund dessen aus den Transformationseigenschaften des Polarisierbarkeitstensors $\boldsymbol{\alpha}$ die Gesetzmäßigkeiten der RAMAN-Streuung für eine entartete Symmetrierasse ab. Welche Symmetrierassen sind bei der Gruppe $D_{6h}$ RAMAN-aktiv? Wie groß ist bei Benzol die Anzahl der RAMAN-Linien?

**Lösung:**

Eine Symmetrieoperation $\sigma(\varphi)$, die eine Drehung $\varphi$ um die Hauptdrehachse oder eine Spiegelung an der $x, y$-Ebene enthält, transformiert nach 3.1. den Ortsvektor $\boldsymbol{r} = (x, y, z)$ eines Punktes in den Ortsvektor $\hat{\boldsymbol{r}} = (\hat{x}, \hat{y}, \hat{z})$:

$$\hat{\boldsymbol{r}} = \sigma \boldsymbol{r} = \begin{pmatrix} \cos\varphi & \sin\varphi & 0\\ -\sin\varphi & \cos\varphi & 0\\ 0 & 0 & \pm 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x\\ y\\ z \end{pmatrix}. \quad (2)$$

Ebenso transformiert sich das elektrische Feld:

$$\hat{\boldsymbol{E}} = \boldsymbol{\sigma E}. \tag{3}$$

Für das elektrische Moment folgt

$$\hat{\boldsymbol{m}}_\mathrm{e} = \boldsymbol{\sigma m}_\mathrm{e} = \boldsymbol{\sigma \alpha E} = \boldsymbol{\sigma \alpha \sigma}^{-1}\hat{\boldsymbol{E}}. \tag{4}$$

Der Tensor der Polarisierbarkeit transformiert sich daher:

$$\hat{\boldsymbol{\alpha}} = \boldsymbol{\sigma \alpha \sigma}^{-1}. \tag{5}$$

Für optisch nichtaktive Moleküle ist $\alpha_{ik} = \alpha_{ki}$. Wir schreiben $\boldsymbol{\alpha}$ als einspaltigen Tensor

$$\boldsymbol{\alpha} = \begin{pmatrix} \alpha_{xx} \\ \alpha_{xy} \\ \alpha_{xz} \\ \alpha_{yy} \\ \alpha_{yz} \\ \alpha_{zz} \end{pmatrix}. \tag{6}$$

Wie man sich durch Ausmultiplizieren überzeugt, kann (5) in der Form

$$\hat{\boldsymbol{\alpha}} = \begin{pmatrix} \alpha_{\hat{x}\hat{x}} \\ \alpha_{\hat{x}\hat{y}} \\ \alpha_{\hat{x}\hat{z}} \\ \alpha_{\hat{y}\hat{y}} \\ \alpha_{\hat{y}\hat{z}} \\ \alpha_{\hat{z}\hat{z}} \end{pmatrix} = \boldsymbol{\sigma}_\alpha \boldsymbol{\alpha} \tag{7}$$

mit

$$\boldsymbol{\sigma}_\alpha = \begin{pmatrix} \cos^2\varphi & 2\cos\varphi\sin\varphi & 0 & \sin^2\varphi & 0 & 0 \\ -\sin\varphi\cos\varphi & \cos^2\varphi - \sin^2\varphi & 0 & \sin\varphi\cos\varphi & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \pm\cos\varphi & 0 & \pm\sin\varphi & 0 \\ \sin^2\varphi & -2\sin\varphi\cos\varphi & 0 & \cos^2\varphi & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \mp\sin\varphi & 0 & \pm\cos\varphi & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \tag{8}$$

dargestellt werden. Hieraus entnimmt man

$$\alpha_{\hat{x}\hat{x}} + \alpha_{\hat{y}\hat{y}} = \alpha_{xx} + \alpha_{yy}. \tag{9}$$

Die Kombination $\alpha_{xx} + \alpha_{yy}$ ist somit gegen Symmetrieoperationen jeder Art invariant und gehört damit der totalsymmetrischen Symmetrierasse an (vgl. Charaktertafeln entarteter Punktgruppen). Für die Transformation von $\alpha_{xx} - \alpha_{yy}$ erhält man

$$\alpha_{\hat{x}\hat{x}} - \alpha_{\hat{y}\hat{y}} = (\alpha_{xx} - \alpha_{yy})\cos 2\varphi + 2\alpha_{xy}\sin 2\varphi. \tag{10}$$

Ferner ist

$$2\alpha_{\hat{x}\hat{y}} = -(\alpha_{xx} + \alpha_{yy})\sin 2\varphi + 2\alpha_{xy}\cos 2\varphi. \tag{11}$$

$\alpha_{xx} - \alpha_{yy}$ und $2\alpha_{xy}$ können hiernach bezüglich der Transformation $\boldsymbol{\sigma}(\varphi)$ wie die Koordinaten eines entarteten Punktepaares behandelt werden. Die Spur dieser Symmetrieoperationen ist

$2\cos 2\varphi$. Man erhält damit die folgenden Spuren: $\chi(1) = 2$, $\chi(C_6) = -1$, $\chi(C_3) = -1$, $\chi(C_2) = 2$, $\chi(i) = 2$, $\chi(S_3) = -1$, $\chi(S_6) = -1$, $\chi(\sigma_h) = 2$. Gegenüber Drehungen $C_2'$ um eine Achse senkrecht zur $z$-Achse erhält man in gleicher Weise $\chi(C_2') = 0$, gegenüber Spiegelungen $\sigma_v$ und $\sigma_d$ ebenfalls $\chi(\sigma_v) = 0$ und $\chi(\sigma_d) = 0$. Das Paar $\alpha_{xx} - \alpha_{yy}$, $2\alpha_{xy}$ verhält sich somit gegenüber Symmetrieoperationen der Gruppe wie die Rasse $E_{2g}$ (vgl. Charaktertafel). Ebenso ergibt sich, daß das Paar $(\alpha_{xz}, \alpha_{yz})$ wie $E_{1g}$ transformiert.
RAMAN-Linien senden daher die Symmetrierassen $A_{1g}$, $E_{1g}$ und $E_{2g}$ aus. Das ist in der letzten Spalte der Charaktertafeln nach Tab. 6.3.1 eingetragen.
Die Anzahl der RAMAN-Linien für die einzelnen Rassen ist in Tab. 7.3.4 zusammengestellt. $C_6H_6$ sendet danach 7 RAMAN-Linien aus.

### 7.3.6. Spektroskopische Strukturanalyse

Für $BF_3$ werden im IR-Spektrum und im RAMAN-Spektrum drei Linien infolge von Schwingungsübergängen gemessen. Untersuchen Sie auf Grund dessen, ob $BF_3$ die gleiche Struktur wie $NH_3$ (vgl. Bild 6.1.5) haben kann, und stellen Sie eine Theorie über die Struktur des Moleküls auf.

**Lösung:**

$NH_3$ gehört der Gruppe $C_{3v}$ an. Nach der Charaktertafel kann diese Punktgruppe nur für die Symmetrierassen $A_1$ und $E$ IR- und RAMAN-Linien aufweisen. Nach 6.3.3. erhält man die Schwingungsanzahlen gemäß Tab. 7.3.5, d. h. insgesamt vier IR- und vier RAMAN-Linien.
$BF_3$ kann deshalb nicht die Struktur des $NH_3$-Moleküls haben. Nimmt man an, daß sich das B-Atom im Schwerpunkt, die F-Atome in den Ecken eines gleichseitigen Dreiecks befinden, so erhält man für $BF_3$ die Symmetriegruppe $D_{3h}$. Ihre Spektrallinien gehen aus Tab. 7.3.6 hervor und bestätigen die Hypothese, daß $BF_3$ ein ebenes Molekül ist. Der Nachweis zusätzlicher Linien würde dieser Hypothese entgegenstehen.



### Aufgaben

A 7.3.1. Stellen Sie die Tafel der Tensorprodukte für die Symmetriegruppe $C_{2v}$ auf.

A 7.3.2. Bestimmen Sie für die Symmetriegruppe $C_{2v}$ die Symmetrierassen, von denen IR-Übergänge in den Grundzustand erfolgen. Wie ist die Strahlung polarisiert?

A 7.3.3. Welcher IR-Übergang ergibt für die $C_s$-Gruppe eine in der $z$-Achse polarisierte Strahlung?

A 7.3.4. Bestimmen Sie die erlaubten Übergänge in den Zustand $A_2$ bei den IR-Spektrallinien der Gruppe $C_{2v}$. Wie ist die Strahlung polarisiert?

A 7.3.5. Welche IR-Übergänge aus der Symmetrierasse $B_{1g}$ liefern in der Gruppe $D_{2h}$ eine elektrische Schwingung in der Hauptdrehachse?

A 7.3.6. Stellen Sie die Multiplikationstafel für alle Tensorprodukte der Gruppe $D_{4d}$ auf.

A 7.3.7. Bestimmen Sie für die Symmetriegruppe $D_{4d}$ alle IR-Übergänge aus oder in den Grundzustand. Wie schwingt der elektrische Vektor?

A 7.3.8. Bestimmen Sie für die Gruppe $D_{4d}$ alle IR-Übergänge zwischen angeregten Zuständen sowie die Schwingungsrichtung des elektrischen Vektors.

A 7.3.9. Wie verhält sich der Polarisierbarkeitskoeffizient $\alpha_{xz}$ bei $H_2O$ ($C_{2v}$) gegenüber einer Drehung von 180° um die Hauptdrehachse?

A 7.3.10. Wie verhält sich $\alpha_{xz}$ bei $NH_3(C_{3v})$ gegen eine Drehung $\varphi$ um die Hauptdrehachse?

A 7.3.11. Bestimmen Sie für das $H_2O$-Molekül ($C_{2v}$) die Anzahl der IR- und der RAMAN-Linien in den einzelnen Symmetrierassen.

A 7.3.12. Ozon enthält in seinem IR-Spektrum drei Linien. Untersuchen Sie, ob die drei Atome in den Ecken eines gleichseitigen Dreiecks liegen können.

A 7.3.13. Eine IR-Linie ist nach der klassischen Theorie erlaubt, wenn der Charakter $\chi(\sigma_{jk})$ der irreduziblen Darstellung im Charakter $\chi_m(\sigma_j)$ der Transformation des elektrischen Momentes enthalten ist. Stellen Sie auf Grund dessen eine Auswahlregel für das Auftreten von IR-Linien durch Schwingungsübergänge auf.

A 7.3.14. Geben Sie die Charaktere $\chi_\alpha(\sigma_{jk})$ der Darstellung für die Polarisierbarkeitskomponenten von folgenden Operationen an: $C_4$, $C_4^2$, $C_6$, $i$, $S_4$, $S_6$.

A 7.3.15. Nach der klassischen Theorie ist eine RAMAN-Linie erlaubt, wenn $\chi(\sigma_{jk})$ im Charakter $\chi_\alpha$ der Transformation des Polarisierbarkeitstensors enthalten ist. Stellen Sie die Formel für die Häufigkeit $n_\alpha(\pi_i)$ des Auftretens eines irreduziblen Zustandes $\sigma_{jk}$ in der reduzierten Darstellung des Polarisierbarkeitstensors auf, und leiten Sie daraus eine Auswahlregel für das Auftreten von RAMAN-Linien ab.

A 7.3.16. Bestimmen Sie nach der in A 7.3.15. aufgestellten Auswahlregel die Symmetrierassen der Gruppe $D_{2h}$, bei denen RAMAN-Linien auftreten.

# 8. Laser und Holografie

## 8.1. Induzierte Emission

### E Einführung

*Einstein-Koeffizient für die induzierte Übergangswahrscheinlichkeit*

Bei der induzierten Emission von Licht wird der Quantenübergang vom angeregten Zustand $W_2$ in den darunterliegenden $W_1$ durch ein von außen angelegtes Strahlungsfeld verursacht (vgl. Bild 8.1.1). $W_1$ und $W_2$ sind die gleichen Energiezustände wie bei der spontanen Emission und der Absorption.

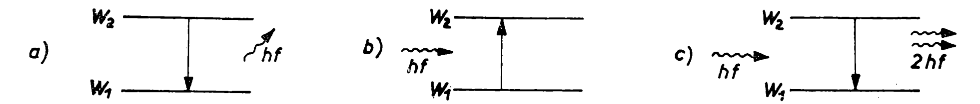



Bild 8.1.1. Wechselwirkung Teilchen—Strahlung.
a) spontane Emission, b) Absorption, c) induzierte Emission

Übergangswahrscheinlichkeit und Intensität des induzierten Strahlungsfeldes sind proportional der spektralen Energiedichte $\varrho_f$ des äußeren Feldes:

$$P_{\mathrm{ind}} = P_{\mathrm{ind}}(W_2 \to W_1) = B_{21}\varrho_f(f_r). \qquad (1)$$

$B_{21}$ ist eine Materialkonstante. Sie heißt *Einstein-Koeffizient* für die induzierte **Übergangswahrscheinlichkeit.**

Die Untersuchung über den thermodynamischen Gleichgewichtszustand von spontaner Emission, Absorption und induzierter Emission ergibt (vgl. 8.1.1.), daß bei vorgegebener spektraler Energiedichte die Übergangswahrscheinlichkeiten für die induzierte Emission und für die Absorption gleich sind. Der EINSTEIN-Koeffizient $B_{12}$ der Absorption und der EINSTEIN-Koeffizient $B_{21}$ der induzierten Emission stimmen überein:

$$\boxed{B_{12} = B_{21}}\,. \qquad (2)$$

*Eigenschaften der induzierten Emission*

Bei der induzierten Emission wird die Ladungsverteilung eines Atoms unter dem Einfluß des Strahlungsfeldes verändert. Die positiven und die negativen Ladungen oszillieren mit der Frequenz $f$ der einfallenden Lichtwelle, wodurch ein schwingender Dipol entsteht. Seine Achse hat die Richtung des elektrischen Feldes der einfallenden Lichtwelle und steht damit senkrecht zur Einfallsrichtung. Das emittierte Licht des oszillierenden Dipols hat seine größte Intensität in der Richtung senkrecht zur Dipolachse, die mit der Richtung der einfallenden Welle identisch ist.
Wirkt das induzierende Licht auf eine große Anzahl angeregter Atome, so entstehen Dipole mit gleicher Ausstrahlungsrichtung. Die einfallende Lichtwelle läßt die Atome unabhängig von ihrer Verteilung im Raum phasenrichtig schwingen. Infolgedessen überlagern sich in Richtung der induzierenden Welle die Dipolcharakteristiken zu einer ebenen Welle, deren Abgrenzung durch die Beugung bestimmt wird. Dagegen erfolgt in der Gegenrichtung Auslöschung durch Interferenz (vgl. [4] 5.1.6.). Einfallende und induzierte Lichtwelle haben daher die gleiche Richtung.

*Besetzungsinversion*

Bezeichnet $n_1$ die Konzentration der Atome bzw. Moleküle im Grundzustand $W_1$, so erhält man für die Konzentration der Atome bzw. Moleküle, die in der Zeit $\mathrm{d}t$ aus dem Strahlungsfeld ein Photon absorbieren, nach (5.1./4) und Bild 8.1.1

$$\mathrm{d}N_{\mathrm{abs}} = n_1 P_{\mathrm{abs}}\,\mathrm{d}t = n_1 B_{12} \varrho_f(f_{\mathrm{r}})\,\mathrm{d}t. \tag{3a}$$

Für die Konzentration der induzierten Emissionsakte ergibt sich nach (1) und Bild 8.1.1

$$\mathrm{d}N_{\mathrm{ind}} = n_2 P_{\mathrm{ind}}\,\mathrm{d}t = n_2 B_{21} \varrho_f(f_{\mathrm{r}})\,\mathrm{d}t, \tag{3b}$$

wobei $n_2$ die Konzentration der Atome im angeregten Zustand $W_2$ angibt.
Die spontan emittierten Photonen laufen dagegen beliebig in den gesamten Raum und liefern keinen merklichen Beitrag zur Energiedichte der gerichteten Welle.
Berücksichtigt man die EINSTEIN-Relation (2), so ergibt sich für die Anzahl der effektiv erzeugten Photonen

$$\mathrm{d}N = \mathrm{d}N_{\mathrm{ind}} - \mathrm{d}N_{\mathrm{abs}} = B_{21} \varrho_f(f_{\mathrm{r}})\, n_{\mathrm{p}}\,\mathrm{d}t. \tag{3}$$

Darin heißt die Größe

$$n_{\mathrm{p}} = n_2 - n_1 \tag{4}$$

**Besetzungsdifferenz.**
Nach (3) kann durch induzierte Emission die Energie einer Lichtwelle nur verstärkt werden, wenn die Besetzungsdifferenz $n_{\mathrm{p}}$ größer als Null ist, d. h. sich mehr Atome im angeregten Zustand $W_2$ als im Grundzustand $W_1$ befinden:

$$n_{\mathrm{p}} = n_2 - n_1 > 0. \tag{5}$$

Im thermodynamischen Gleichgewicht genügen die Atome der MAXWELL-BOLTZMANN-Verteilung

$$n_i = n_0\,\mathrm{e}^{-\frac{W_i}{kT}} \qquad (i = 1, 2). \tag{6}$$

$n_0$ kennzeichnet eine Konstante mit der Maßeinheit Teilchen/m³. Der angeregte Zustand $W_2$ ist daher wegen $W_2 > W_1$ im **thermodynamischen Gleichgewicht** weniger wahrscheinlich als der Grundzustand $W_1$ und somit $n_2$ kleiner als $n_1$. $n_p > 0$ bzw. $n_2 > n_1$ wird als **Besetzungsumkehr** bzw. **Inversionszustand** bezeichnet. Eine Substanz, in der durch Besetzungsinversion induzierte Emission hervorgerufen wird, heißt **laseraktives** oder kurz **aktives** Medium.
Der Inversionszustand entspricht theoretisch einer negativen absoluten Temperatur und kann daher durch keinen thermodynamischen Gleichgewichtszustand realisiert werden. Die Besetzungsumkehr wird durch ständiges Zuführen von Energie erreicht, das als **optisches Pumpen** bezeichnet wird. Beim Abschalten der Pumpleistung kehrt das thermodynamische System in den durch die Raumtemperatur bestimmten Gleichgewichtszustand zurück.

**Beispiel 8.1.1. Negative absolute Temperatur durch Besetzungsumkehr**

Beträgt die Anzahl der Atome im angeregten Zustand z. B. das Zehnfache der Atome im Grundzustand und liegt eine Energielücke $\Delta W = W_2 - W_1 = 1$ eV vor, so erhält man aus (6)

$$T = -\frac{W_2 - W_1}{k \ln \frac{n_2}{n_1}} = -\frac{1 \cdot 1{,}60 \cdot 10^{-19}}{1{,}38 \cdot 10^{-23} \cdot \ln 10}\,\mathrm{K} = -5040\,\mathrm{K}.$$

Für $\frac{n_2}{n_1} \to 1$ wächst der Parameter $T$ zunächst von positiven endlichen Werten gegen $+\infty$ und springt mit weiter zunehmenden Werten $\frac{n_2}{n_1}$ auf $-\infty$. Danach durchläuft $T$ den negativen Zahlenbereich und fällt dabei gegen Null ab.



## Probleme

### 8.1.1. Einstein-Relation

Ein Strahlungsfeld befinde sich im thermodynamischen Gleichgewicht mit den Bausteinen des Rubin-Kristall-Lasers. Berechnen Sie die EINSTEIN-Koeffizienten der Übergangswahrscheinlichkeiten bei der spontanen Emission, der Absorption und der induzierten Emission. Die Frequenz der auf den Kristall gerichteten Strahlung sei identisch mit der Resonanzfrequenz des Rubinlasers. Für die Lebensdauer des angeregten Zustandes werde als Mittelwert $\tau = 3$ ms gesetzt.
Wie groß ist das Verhältnis zwischen der Übergangswahrscheinlichkeit der induzierten und der spontanen Emission? Dabei ist ein Strahlungsfeld mit der spektralen Energiedichte $\varrho_f = 0{,}5$ J s m$^{-3}$ vorauszusetzen. Die Resonanzfrequenz beträgt $f_r = 4{,}32 \cdot 10^{14}$ Hz.

**Lösung:**

Im thermodynamischen Gleichgewicht sind die Atome bzw. Moleküle nach der MAXWELL-BOLTZMANN-Verteilung angeregt, so daß die Wahrscheinlichkeit, ein Teilchen im Energiezustand $W_i$ anzutreffen, proportional

$$\mathrm{e}^{-\frac{W_i}{kT}}$$

ist. Aus der Forderung gleicher Häufigkeit von Emission und Absorption folgt nach (5.1./2), (5.1./4) und (8.1./5)

$$e^{-\frac{W_2}{kT}}[A_{21} + \varrho_f(f_r) B_{21}] = e^{-\frac{W_1}{kT}} \varrho_f(f_r) B_{12}. \qquad (1)$$

Diese Gleichung kann nach der spektralen Energiedichte aufgelöst werden:

$$\varrho_f(f_r) = \frac{A_{21}}{B_{12} e^{\frac{hf_r}{kT}} - B_{21}} \quad \text{mit} \quad f_r = \frac{W_2 - W_1}{h}. \qquad (2)$$

Das induzierte Strahlungsfeld, das im Gleichgewicht mit den Bausteinen des Rubinlasers steht, so daß Emission und Absorption sich die Waage halten, kann als das Feld einer Hohlraumstrahlung betrachtet werden. Für diese ist die spektrale Energiedichte nach dem PLANCKschen Strahlungsgesetz (vgl. [3] 4.2./2)

$$\varrho_f(f) = \frac{g \cdot 4\pi h f^3}{c^3 \left(e^{\frac{hf}{kT}} - 1\right)} \quad (g = 1, 2). \qquad (3)$$

Darin bedeutet $c = \frac{c_0}{n}$ die Lichtgeschwindigkeit im Hohlraum.

(2) und (3) können für beliebige Werte $f = f_r$ nur übereinstimmen, wenn die EINSTEINschen Relationen

$$\frac{B_{12}}{B_{21}} = 1, \quad \text{d. h.} \quad \boxed{B_{12} = B_{21}} \qquad (4)$$

und

$$\boxed{\frac{1}{\tau} = A_{21} = \frac{g \cdot 4\pi h f^3}{c^3} B_{21}} \qquad (5)$$

gelten.

Nach (4) sind die Übergangswahrscheinlichkeiten bei der Absorption und bei der induzierten Emission gleich. (5) setzt das Verhältnis zwischen spontaner und induzierter Emission bei Kenntnis der Energiedichte des äußeren Feldes fest.

Im vorliegenden Fall ist

$$A_{21} = \frac{1}{\tau} = \frac{1}{3 \cdot 10^{-3}} \text{ s}^{-1} = \frac{1}{3} \cdot 10^3 \text{ s}^{-1}$$

bekannt. Damit lassen sich $B_{12}$ und $B_{21}$ durch Auflösen aus (5) berechnen:

$$B_{12} = B_{21} = \frac{(3 \cdot 10^8)^3}{8\pi \cdot 6{,}626 \cdot 10^{-34} \cdot (4{,}32 \cdot 10^{14})^3} \frac{10^3}{3} \text{ J}^{-1} \text{ s}^{-2} \text{ m}^3 = 6{,}7 \cdot 10^{15} \text{ J}^{-1} \text{ s}^{-2} \text{ m}^3.$$

Mit der zugrunde gelegten spektralen Energiedichte erhält man für das Verhältnis zwischen den Übergangswahrscheinlichkeiten der induzierten und der spontanen Emission

$$\frac{\varrho_f B_{21}}{A_{21}} = \frac{0{,}5 \cdot 6{,}7 \cdot 10^{15}}{\frac{1}{3} \cdot 10^3} = 1{,}0 \cdot 10^{13}.$$

### 8.1.2. Halbwertbreite der Spektrallinien und mittlere Lebensdauer der Zustände bei spontaner Emission

Nach der DRUDEschen Formel (1.4./28) ist die komplexe Brechzahl $n'$ gemäß

$$\frac{n'^2 - 1}{n'^2 + 2} = \frac{1}{3\varepsilon_0} \sum_i \frac{N_i Z_i^2 e^2}{m_i(\omega_i^2 - \omega^2 + i\varrho_i\omega_i)} \tag{1}$$

mit den Kreisfrequenzen $\omega_i$ der Eigenschwingungen verknüpft. $m_i$ kennzeichnet die Masse, $N_i$ die Konzentration der schwingenden Teilchen. $Z_i e$ gibt ihre Ladung, $\varrho_i$ ihren Reibungskoeffizienten an. Zwischen den mittleren Lebensdauerwerten $\tau_1$ und $\tau_2$ der beiden zugeordneten Quantenzustände und der natürlichen Bandbreite $\Delta\omega$, d. h. der Halbwertbreite der Spektrallinie ohne Beeinflussung durch Bewegungs- und Wärmeprozesse, besteht die Beziehung

$$\Delta\omega = \frac{1}{\tau_1} + \frac{1}{\tau_2}. \tag{2}$$

Bestimmen Sie die Intensität bei der Emission in der Umgebung einer Eigenfrequenz und normieren Sie die Intensitätsfunktion über den gesamten Spektralbereich. Berechnen Sie das Maximum der Intensitätsfunktion sowie deren Mittelwert, wenn mit einer gleichmäßigen Strahlung über den Frequenzbereich $\Delta f = \frac{\Delta\omega}{2\pi}$ gerechnet wird.

Wie groß ist die Linienbreite bei spontaner Emission zwischen zwei Energiezuständen, wenn die mittleren Werte der Lebensdauer $\tau_1 = 5 \cdot 10^{-9}$ s, $\tau_2 = 3 \cdot 10^{-3}$ s betragen? Die Wellenlänge der emittierten Strahlung sei $\lambda_0 = 694$ nm.

**Lösung:**

Wir betrachten eine spezielle Eigenschwingung, die wir durch den Index $i = 0$ kennzeichnen. Die benachbarten Eigenschwingungen seien von der untersuchten so weit entfernt, daß für Kreisfrequenzen $\omega$ nahe $\omega_0$ Dispersion und Absorption vernachlässigt werden können. Die DRUDEsche Formel läßt sich daher in der Form

$$n'^2 = n_c^2 + \frac{n'^2 + 2}{3\varepsilon_0} \frac{N_0 Z_0 e^2}{m_0(\omega_0^2 - \omega^2 + i\varrho_0\omega_0)} \tag{3}$$

mit

$$n_c^2 = 1 + \frac{n'^2 + 2}{3\varepsilon_0} \sum_{i \neq 0} \frac{N_i Z_i e^2}{m_i(\omega_i^2 - \omega_0^2)} \tag{4}$$

darstellen. Im zweiten Summanden der Gleichungen (3) und (4) kann angenähert $n'^2$ durch 1 ersetzt werden.
Wir schreiben

$$n' = n(1 - i\varkappa) \tag{5}$$

und erhalten damit aus (3)

$$n^2(1 - i\varkappa)^2 = n_c^2 + \frac{N_0 Z_0 e^2}{\varepsilon_0 m_0(\omega_0^2 - \omega^2 + i\varrho_0\omega_0)}. \tag{6}$$

$\varkappa(\omega)$ ist sowohl der Absorption beim Durchgang als auch der Intensität bei der Emission des Lichtes proportional. Aus den Imaginärteilen der Gleichung (6) erhalten wir durch Auflösen nach $\varkappa$

$$\varkappa(\omega) = \frac{N_0 Z_0 e^2}{2n^2 m_0 \varepsilon_0} \frac{\varrho_0\omega_0}{(\omega_0^2 - \omega^2)^2 + \varrho_0^2\omega_0^2}. \tag{7}$$

Anstelle von $\omega_0^2 - \omega^2 = (\omega_0 + \omega)(\omega_0 - \omega)$ können wir angenähert $2\omega_0(\omega_0 - \omega)$ schreiben:

$$\varkappa(\omega) = \frac{N_0 Z_0 e^2}{2n^2 m_0 \varepsilon_0 \omega_0} \frac{\varrho_0}{4(\omega_0 - \omega)^2 + \varrho_0^2}. \tag{8}$$

Die Intensitätsfunktion $\varkappa(\omega)$ nimmt ihr Maximum für $\omega = \omega_0$ an, während die beiden Halbwertstellen durch

$$\omega_{1/2} = \omega_0 \pm \frac{\varrho_0}{2} \tag{9}$$

bestimmt sind (vgl. 1.4.7.). Für die Halbwertbreite $\Delta\omega$ erhält man daher

$$\Delta\omega = \varrho_0. \tag{10}$$

Zur Normierung der Intensitätsfunktion berechnen wir das Integral

$$\Delta\omega \int_0^\infty \frac{d\omega}{4(\omega_0 - \omega)^2 + \Delta\omega^2} = \frac{1}{2}\left[\arctan \frac{2(\omega - \omega_0)}{\Delta\omega}\right]_0^\infty. \tag{11}$$

Wegen

$$\omega_0 \gg \Delta\omega \tag{12}$$

folgt aus (11)

$$\Delta\omega \int_0^\infty \frac{d\omega}{4(\omega_0 - \omega)^2 + \Delta\omega^2} = \frac{\pi}{2} \quad \text{bzw.} \quad \Delta f \int_0^\infty \frac{df}{4(f_0 - f)^2 + \Delta f^2} = \frac{\pi}{2} \tag{13}$$

mit $\omega = 2\pi f$, $\Delta\omega = 2\pi\,\Delta f$, $\omega_0 = 2\pi f_0$.
Als normierte Intensitätsfunktion $g(f)$ mit der Eigenschaft

$$\int_0^\infty g(f)\, df = 1 \tag{14}$$

erhalten wir damit

$$g(f) = \frac{2}{\pi} \frac{\Delta f}{4(f - f_0)^2 + \Delta f^2} \quad \text{bzw.} \quad g(\omega) = \frac{2}{\pi} \frac{\Delta\omega}{4(\omega - \omega_0)^2 + \Delta\omega^2}. \tag{15}$$

Die Intensitätsverteilung (15) wird als **Lorentzsche Linienform** bezeichnet.
Mit den angegebenen Daten folgt aus (2)

$$\Delta\omega = \frac{1}{5 \cdot 10^{-9}}\,\text{s}^{-1} + \frac{1}{3 \cdot 10^{-3}}\,\text{s}^{-1} = 2 \cdot 10^8\,\text{s}^{-1}, \qquad \Delta f = \Delta f_{1/2} = 3{,}2 \cdot 10^7\,\text{Hz}.$$

Das Maximum der Intensitätsfunktion beträgt

$$g_{\max} = 2 \cdot 10^{-8}\,\text{s},$$

die mittlere Intensität über $\Delta f$

$$\bar{g} = \frac{1}{\Delta f} = 3{,}1 \cdot 10^{-8}\,\text{s}.$$

Ferner ist

$$\Delta\lambda_0 = \frac{\lambda_0^2}{c_0} \frac{\Delta\omega}{2\pi} = 5{,}1 \cdot 10^{-14}\,\text{m}, \qquad \frac{\lambda_0}{\Delta\lambda_0} = 1{,}4 \cdot 10^7\,\text{m}.$$

### 8.1.3. Optischer Verstärker

Eine Lichtwelle pflanze sich durch ein laseraktives Medium fort. Ihre Frequenz $f$ liege innerhalb der Linienbreite des Laserüberganges (Halbwertbreite nach 1.4.6.). Durch induzierte Emission wird die Lichtwelle verstärkt, wenn im Lasermedium durch Pumpen Besetzungsinversion erzeugt wird.
Für den Rubinlaser mit $W_1 = W_0$ beträgt die Frequenz der ausgesandten Strahlung $f_0 = 4{,}32 \times 10^{14}$ Hz. Die mittlere Lebensdauer im angeregten Zustand ist bei Zimmertemperatur gleich $\tau = \frac{1}{A_{21}} = 4{,}5 \cdot 10^{-3}$ s, die Bandbreite $\frac{\Delta f}{c_0} = 1600\ \text{m}^{-1}$. Rubin hat die Brechzahl $n = 1{,}76$.
Berechnen Sie die Verstärkung für einen 5 cm langen Kristall in der Bandmitte, wenn die Besetzungsdifferenz $n_\text{p} = 8 \cdot 10^{22}\ \text{m}^{-3}$ erzeugt wird. Die mittlere Lebensdauer im Zustand $W_1$ kann als unendlich groß angesetzt werden.

**Lösung:**

Die spektrale Energiedichte ist

$$\boxed{\varrho_f = Nhfg(f)}, \tag{1}$$

wobei $g(f)$ die Intensitätsfunktion nach (8.1.2./15) kennzeichnet. Nach (8.1./3) folgt für die Änderung der Quantenkonzentration infolge der Anregung durch die Lichtwelle und der Absorption

$$\frac{\mathrm{d}N}{\mathrm{d}t} = B_{21}\varrho_f n_\text{p} \tag{2}$$

und daraus in Verbindung mit (1)

$$\frac{\mathrm{d}N}{\mathrm{d}t} = B_{21}Nhfg(f)\, n_\text{p}. \tag{3}$$

Zur übersichtlichen Darstellung führen wir die von der Frequenz abhängige Größe

$$\boxed{B_f = B_{21}hfg(f) = \frac{c_0^3 g(f)}{2 \cdot 4\pi n^3 f^2 \tau}} \tag{4}$$

ein. $B_f$ hat die Maßeinheit $\text{m}^3\ \text{s}^{-1}$ und heißt **Einstein-Koeffizient für die induzierte Emission.** Für die Bandmitte erhält man

$$B_f(f_0) = \frac{c_0^3}{4\pi^2 n^3 f_0^2 \tau\, \Delta f}. \tag{5}$$

Setzen wir $B_f$ in (3) ein, so ergibt sich

$$\frac{\mathrm{d}N}{\mathrm{d}t} = B_f N n_\text{p}. \tag{6}$$

Wir legen die $z$-Achse in die Ausbreitungsrichtung der Lichtwelle. Für die Ableitung nach der Zeit kann wegen

$$\frac{\mathrm{d}\varrho_f}{\mathrm{d}t} = c\,\frac{\mathrm{d}\varrho_f}{\mathrm{d}z} \tag{7}$$

die Ableitung nach der Ausbreitungskoordinate $z$ eingeführt werden. Anstelle (3) ergibt sich die Differentialgleichung

$$\frac{d\varrho_f}{dz} = B_f \frac{n_p}{c} \varrho_f. \tag{8}$$

Ihre Lösung lautet

$$\varrho_f = \varrho_0 \exp\left(\frac{n_p}{c} B_f z\right). \tag{9}$$

Die Verstärkung in Dezibel ist nach ([4] 4.2./14) für zwei Energiegrößen $\varrho$ und $\varrho_0$ durch

$$b_{dB} = 10 \lg \frac{\varrho}{\varrho_0} = 4{,}343 \ln \frac{\varrho}{\varrho_0}$$

definiert. Für die Verstärkung über die Länge $l$ erhalten wir

$$b_{dB} = 4{,}343 \frac{n_p}{c} B_f l = \frac{4{,}343 c_0^2 n_p l}{8\pi f^3 \tau n^2} g(f). \tag{10}$$

Für die Resonanzfrequenz $f_0$ beträgt sie nach (4)

$$b_{f_0} = \frac{1{,}086\, c_0^2 n_p l}{\pi^2 n^2 f_0^2 \tau\, \Delta f}. \tag{11}$$

Mit den angegebenen Werten erhalten wir aus (5)

$$B_{f_0} = \frac{(3 \cdot 10^8)^2}{4\pi^2 \cdot 1{,}76^3 \cdot (4{,}32 \cdot 10^{14})^2 \cdot 4{,}5 \cdot 10^{-3} \cdot 1600}\ \mathrm{m^3\,s^{-1}} = 3{,}11 \cdot 10^{-16}\ \mathrm{m^3\,s^{-1}}.$$

Aus (10) ergibt sich als Verstärkung in der Bandmitte

$$b_{dB} = \frac{4{,}343 \cdot 8 \cdot 10^{22} \cdot 3{,}11 \cdot 10^{-16} \cdot 5 \cdot 10^{-2} \cdot 1{,}76}{3 \cdot 10^8}\ \mathrm{dB} = 0{,}03\ \mathrm{dB}.$$

## 8.1.4. Wirkungsquerschnitt und Einstein-Koeffizient

Die Wechselwirkung zwischen dem Feld und den Elementarteilchen vollzieht sich bei Emission und Absorption durch Stoßprozesse. Untersuchen Sie die Verknüpfung zwischen dem EINSTEIN-Koeffizienten für die induzierte Emission $B_f$ und dem Wirkungsquerschnitt $\sigma$.
Für den Rubinkristall ist $B_f = 3{,}1 \cdot 10^{-16}\ \mathrm{m^3\,s^{-1}}$. Berechnen Sie daraus den Wirkungsquerschnitt bei der Wechselwirkung zwischen Photonen und Atomen oder Molekülen. Die Brechzahl ist $n = 1{,}76$.

**Lösung:**

Wir setzen stoßende Teilchen gleicher Geschwindigkeit $v$ voraus und zählen nur Stöße, die zum Übergang zwischen den Energiezuständen $W_1$ und $W_2$ führen. Bezeichnet $n_1$ die Konzentration der Teilchen im Zustand $W_1$, so ergibt sich für die Wahrscheinlichkeit, daß ein Photon über die Strecke dz mit einem Atom zusammenstößt und dieses anregt,

$$P\, dz = \sigma n_1\, dz. \tag{1}$$

Darin bedeutet $P$ die Wahrscheinlichkeit für einen Stoß auf der Strecke 1 m.

Die Konzentration der Photonen verringert sich infolgedessen in der Zeit d$t$ um

$$(\mathrm{d}N)_{\mathrm{abs}} = -N\sigma n_1 \frac{\mathrm{d}z}{\mathrm{d}t}\,\mathrm{d}t = -N\sigma n_1 c\,\mathrm{d}t, \tag{2}$$

wobei $N$ die Konzentration der Photonen kennzeichnet. $c = \frac{c_0}{n}$ ist die Photonengeschwindigkeit im Medium.
Für Emissionsprozessse kann man in gleicher Weise

$$(\mathrm{d}N)_{\mathrm{ind}} = N\sigma n_2 c\,\mathrm{d}t \tag{3}$$

schreiben. Darin ist $n_2$ die Konzentration der gestoßenen Atome.
Für die Änderung der Photonenkonzentration folgt

$$\frac{\mathrm{d}N}{\mathrm{d}t} = N\sigma(n_2 - n_1)\,c. \tag{4}$$

Nach (8.1.3./6) erhält man für die Änderung der Photonenkonzentration

$$\frac{\mathrm{d}N}{\mathrm{d}t} = NB_f(n_2 - n_1). \tag{5}$$

Aus dem Vergleich von (4) und (5) ergibt sich

$$B_f = \sigma c \qquad \text{bzw.} \qquad \sigma = \frac{B_f n}{c_0}. \tag{6}$$

Mit den vorgegebenen Werten folgt

$$\sigma = \frac{3{,}1 \cdot 10^{-16} \cdot 1{,}76}{3 \cdot 10^8}\,\mathrm{m}^2 = 1{,}8 \cdot 10^{-24}\,\mathrm{m}^2.$$



## Aufgaben

A 8.1.1. Die mittleren Werte der Lebensdauer zwischen zwei Energieniveaus mit dem Abstand 0,85 eV seien $\tau_1 = 50$ ns, $\tau_2 = 100$ ns. Drücken Sie die Linienbreite der Spektrallinie in Einheiten der Wellenzahl $\frac{\Delta f}{c}$ und der Wellenlänge $\Delta\lambda$ aus.

A 8.1.2. Welcher Temperatur der Hohlraumstrahlung entspricht die Strahlung des Rubinlasers der Frequenz $f = 4{,}32 \cdot 10^{14}$ Hz mit der spektralen Energiedichte $\varrho_f = 0{,}1$ J s m$^{-3}$?

A 8.1.3. Bestimmen Sie für eine Spektrallinie der Frequenz $f = 4{,}5 \cdot 10^{14}$ Hz mit LORENTZscher Linienform den Frequenzbereich, innerhalb dessen die Intensität um 10 dB abfällt. Die Bandbreite sei $\Delta f = 10^9$ Hz.

A 8.1.4. Wie groß ist bei LORENTZscher Linienform der Frequenzbereich, innerhalb dessen die Intensität um 3 dB abfällt?

A 8.1.5. Für die Anregung durch Stöße zweiter Art in einem Helium-Neon-Laser beträgt der Wirkungsquerschnitt $0{,}37 \cdot 10^{-20}$ m$^2$. Berechnen Sie daraus den EINSTEINkoeffizienten $B_f$ für die induzierte Emission.

A 8.1.6. Die Verstärkung der Spektrallinie bei $\lambda_0 = 632{,}8$ nm durch einen Neonlaser betrage in der Bandmitte 60 dB. Als Linienbreite werde für den vorgegebenen Gasdruck $\Delta f = 100$ MHz angegeben. Berechnen Sie die Wellenlänge, für die die Verstärkung auf 10 dB abgesunken ist.

A 8.1.7. Bei der Spektrallinie mit **Gaußscher Linienform** ist die Intensitätsverteilung proportional

$$\frac{1}{\Delta f_G} e^{-\left[\frac{2(f-f_0)}{\Delta f_G}\sqrt{\ln 2}\right]^2}.$$

Stellen Sie auf Grund der Normierungsbedingung die Intensitätsfunktion auf.

A 8.1.8. Bei thermisch bewegten Atomen streuen die Resonanzfrequenzen der Einzelstrahler mit GAUSSscher Verteilung, und es tritt infolge des DOPPLER-Effektes eine **Linienverbreiterung** auf. Die Halbwertbreite ist bei vernachlässigbarer natürlicher Linienbreite

$$\Delta f_G = \frac{f_0}{c}\sqrt{\frac{8RT\ln 2}{M}}$$

($R$ Gaskonstante, $M$ relative Molekülmasse). Für das $Ar^+$-Ion beträgt die natürliche Linienbreite bei der Ausstrahlung der Spektrallinie $\lambda_0 = 514{,}5$ nm $\Delta f = 108$ MHz. Unter den Betriebsbedingungen eines $Ar^+$-Lasers stelle sich die Ionentemperatur 3000 K ein. Vergleichen Sie die sich ergebende Bandbreite $\Delta f_G$ mit der natürlichen Linienbreite ($M = 39{,}9$).

A 8.1.9. Für die Strahlung des Helium-Neon-Lasers unter der Frequenz $f_0 = 2{,}63 \cdot 10^{14}$ Hz werde als Wirkungsquerschnitt der Stöße zweiter Art $\sigma = 150 \cdot 10^{-20}$ m$^2$ gemessen. Die Frequenzbreite der Linie sei $\Delta f = 6{,}5 \cdot 10^{10}$ Hz. Berechnen Sie die mittlere Lebensdauer für den spontanen Übergang und den EINSTEIN-Koeffizienten für die spontane Emission in der Bandmitte ($n = 1$).

## 8.2. Laser

### E Einführung

*Prinzipieller Aufbau*

Der Laser ist eine Strahlungsquelle, die durch induzierte Emission einen intensiven, scharf gebündelten, kohärenten Lichtstrahl erzeugt.
Notwendige Voraussetzung für die induzierte Emission ist die **Besetzungsinversion.** Zur Erregung einer **stabilen Oszillation** müssen die Verluste durch die induzierte

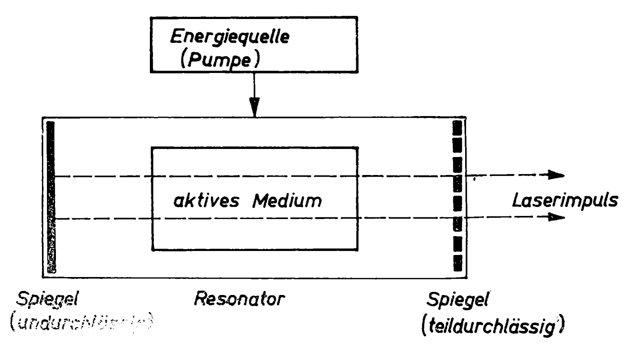



Bild 8.2.1. Prinzipieller Aufbau des Lasers

Emission gedeckt werden. Hierzu ist die erzeugte Laserwelle mit dem aktiven Medium **rückzukoppeln.** Wesentliche Bestandteile des Lasers sind daher das aktive Medium, die Energie- oder Pumplichtquelle und der Resonator für die Rückkopplung. Bild 8.2.1 zeigt den prinzipiellen Aufbau des Lasers.

*Realisierung der Besetzungsinversion*

Bei der Erzeugung der Besetzungsinversion werden Energiezustände mit langer Verweilzeit $\tau$ genutzt (Größenordnung 0,1 bis 1 ms). Sie kann in festen, flüssigen und gasförmigen Stoffen erzeugt werden.
Die Energie kann durch verschiedene Verfahren zugeführt werden. **Optisches Pumpen** (Einstrahlung von Licht) wird in der Regel beim Festkörperlaser verwendet. In Gaslasern wird die Energie durch Stöße bei der **elektrischen Entladung** übertragen. Chemische Laser nutzen die bei **chemischen Prozessen** frei werdende Energie, **Injektions-** bzw. **Halbleiterlaser** die Anregung beim Stromdurchgang.

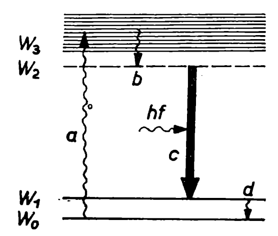



Bild 8.2.2. Energieschema des Festkörperlasers.
$W_0$ Grundzustand, $W_1$ Energiezustand nach der Laseremission, $W_2$ metastabiler Zwischenzustand, $W_3$ Pump- oder Anregungsniveau aus einer Vielzahl von Linien; a Pumpen, b Zwischenübergang in den metastabilen Zustand, c Laseremission, d strahlungslose Rückkehr in den Grundzustand

*Festkörperlaser*

Bild 8.2.2 zeigt das Energieschema des Festkörperlasers. Die Bausteine des aktiven Mediums werden durch intensive Einstrahlung kurzwelligen Lichtes veranlaßt, aus dem **Grundzustand** $W_0$ in das **Pump-** oder **Anregungsniveau** $W_3$ überzugehen (a). Das eingestrahlte Licht hat eine höhere Frequenz als das induzierte Laserlicht. Im allgemeinen besteht $W_3$ aus einem breitbandigen Kontinuum bzw. einer Vielzahl von Linien, so daß für die Anregung ein breitbandiges Spektrum genutzt werden kann.
Im Anregungszustand verbleiben die Atome und Moleküle des aktiven Mediums nur kurze Zeit (um 100 ns). Danach gehen sie auf das **metastabile Zwischenniveau** über (b). Die Differenzenergie wird als Wärmeenergie an das Kristallgitter abgegeben. Das metastabile Zwischeniveau kann bis zu einigen Millisekunden aufrecht erhalten werden. Bei starker Pumpleistung kommt es infolgedessen zu einem gehäuften Auftreten des Anregungszustandes $W_2$ und zur Besetzungsinversion.
Im Zustand $W_2$ genügen bereits wenige, von außen zugeführte Photonen, um einen lawinenartig ablaufenden Strahlungsprozeß zu induzieren (c). Dieser Vorgang stellt den eigentlichen **Laserprozeß** dar. Dabei gehen die Bausteine des aktiven Mediums in den Energiezustand $W_1$ (Niveau nach der Laseremission) über.
In der Regel ist $W_1$ nicht mit dem Grundzustand $W_0$ identisch. In diesem Fall geht das Teilchen des aktiven Mediums strahlungslos mit kurzer Verweilzeit (Mikro- bis Nanosekunden) auf den Grundzustand $W_0$ zurück (d).
Beim Rubinlaser sind $W_0$ und $W_1$ identisch.

*Gaslaser*

Beim Gaslaser werden verschiedene Verfahren angewandt. Der Helium-Neon-Laser arbeitet im wesentlichen nach folgendem Prinzip (vgl. Bild 8.2.3):
Das Heliumatom besitzt zwei langlebige Zustände $2^1S$ und $2^3S$. Sie liegen nahe den Termen der 3s- bzw. 2s-Elektronen des Neonatoms, die für den Laserübergang verantwortlich sind.

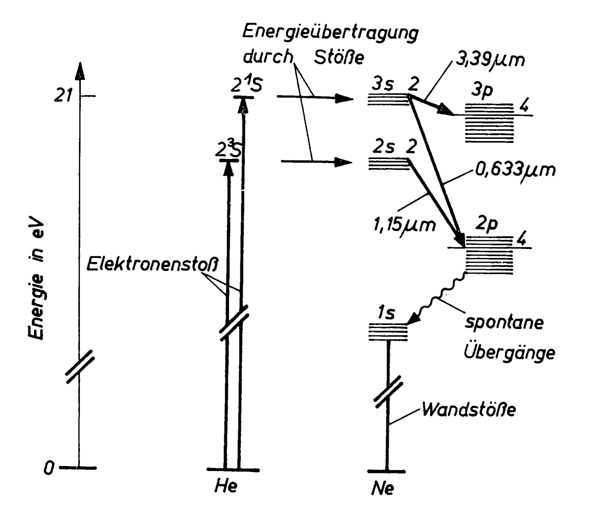



Bild 8.2.3. Termschema des Helium-Neon-Lasers

Die Anregung geschieht durch Elektronenstoß während der Gasentladung. Dabei wird im Neon die BOLTZMANN-Verteilung nur wenig gestört; jedoch werden die Heliumatome angeregt. Sie übertragen ihre Energie auf die Neonatome durch Stöße zweiter Art:

$$He^* + Ne \rightarrow Ne^* + He$$

(* angeregter Zustand). Dieser Prozeß ist bestimmend für den Ablauf der Laserstrahlung, so daß aus dem Wirkungsquerschnitt bei den Stößen auf den EINSTEIN-Koeffizienten $B_f$ geschlossen werden kann. Die Elektronen des Neonatoms gehen dabei in die langlebigen Zustände 3s bzw. 2s über, womit gegenüber dem 3p- bzw. 2p-Zustand Besetzungsinversion auftritt. Induzierte Emission führt zu den Laserübergängen 3s → 3p (3,39 μm), 3s → 2p (0,633 μm), 2s → 2p (1,15 μm). Nach spontaner Emission in den 1s-Zustand gehen die Neonatome im wesentlichen durch Zusammenstöße mit der Wand wieder in den Grundzustand $^1S_0$ zurück.

*Optische Resonatoren*

Die Wahrscheinlichkeit, daß ein Photon eine induzierte Emission auslöst, wächst proportional zu seiner Aufenthaltsdauer im aktiven Medium. Durch Anordnung des aktiven Mediums in einem Resonator läßt sich die **Verweilzeit der Photonen** im aktiven Medium vergrößern und damit die Intensität des induzierenden Strahlungsfeldes erhöhen.

Der optische Resonator wird von parallelen oder gekrümmten Spiegeln abgegrenzt. Um das Laserlicht auszublenden, ist der Resonator optisch teildurchlässig. Derartige Resonatoren heißen **offen.**
Im Resonator wird das elektromagnetische Feld in diskreten Eigenfrequenzen angeregt und verstärkt. Die Abstimmung erfolgt durch Verstellen der Spiegel, wodurch die Phase des induzierten Strahles mit der Phase der auslösenden Welle in Übereinstimmung gebracht, d. h. das induzierte Licht mit dem aktiven Medium rückgekoppelt wird.
Bei optischen Resonatoren betragen die Resonatorabmessungen ein Vielfaches der Wellenlänge. Die Anregung muß daher als **Oberschwingung** sehr hoher Ordnung geschehen.
In einem allseitig geschlossenen Resonator mit dem Volumen $V$ beträgt die Anzahl der transversalen Eigenschwingungen im Frequenzbereich $f \dots f + \mathrm{d}f$ für eine Polarisationsrichtung (vgl. [3] 4.5.4./5)

$$Z_f = 4\pi V \frac{f^2\,\mathrm{d}f}{u^3} \qquad (u \text{ Phasengeschwindigkeit}). \tag{1}$$

Selbst für einen nur sehr kleinen Frequenzbereich werden im geschlossenen Resonator eine große Anzahl Eigenschwingungen angeregt.

**Beispiel 8.2.1. Transversale Eigenschwingungen im geschlossenen Resonator**

Im Frequenzbereich $f = 5 \cdot 10^{14}$ Hz ... $f + \mathrm{d}f = (5 \cdot 10^{14} + 10^8)$ Hz, das entspricht der Frequenzbreite der spontan emittierten gelben Linie, beträgt die Anzahl der Eigenschwingungen für eine Polarisationsrichtung bei 1 cm³ Volumen des Resonators

$$\frac{4\pi \cdot 10^{-6} \cdot (5 \cdot 10^{14})^2 \cdot 10^8}{(3 \cdot 10^8)^3} = 1{,}2 \cdot 10^7.$$

Die Form des geschlossenen Resonators hat, im Gegensatz zum offenen Resonator, keinen Einfluß auf die Anzahl der Eigenschwingungen.

*Offene Resonatoren*

Einen offenen Resonator können die Photonen in bestimmten Richtungen verlassen. Die durch diese Photonen repräsentierten Eigenschwingungen sind daher gedämpft, klingen ab und kommen für die Induzierung der Laserstrahlung nicht in Betracht. Ein offener Resonator besitzt daher in Abhängigkeit von seiner Form und seiner Oberfläche wesentlich weniger Eigenschwingungen als ein geschlossener. Hieraus ergibt sich die Möglichkeit, eine extrem monochromatische Strahlung hoher Bündelungsschärfe anzuregen.
In seiner einfachsten Form wird der offene Resonator durch zwei ebene Spiegel repräsentiert, die sich im Abstand $L$ parallel gegenüberstehen. $L$ heißt **Resonatorlänge.** Sie ist in der Regel groß gegen die Flächenabmessungen der Spiegel.
Der offene Resonator aus zwei ebenen Spiegeln gestattet nur die Anregung von Eigenschwingungen, deren Wellenflächen parallel zu den Spiegelflächen stehen. Auch für diese Wellen treten Verluste durch Beugung auf. Ein vorgegebener Energieanteil verläßt den Resonator infolge Durchlässigkeit der Spiegel. Im Mittel verlassen die

Photonen den Resonator nach der Zeit $T$, die als **mittlere Aufenthaltszeit** bezeichnet wird.
Es verlasse bei der Reflexion an einem der beiden Spiegel der Anteil $d = 1 - r$ der Energiequanten den Resonatorraum. Der zweite Spiegel reflektiere vollständig. Die Beugungsverluste seien zu vernachlässigen. Dann ist die mittlere Aufenthaltsdauer $T$ eines Photons im Resonator

$$T = \frac{L}{c}\,\frac{2}{d} = \frac{2T_0}{d}, \tag{2}$$

wobei $T_0$ die mittlere Aufenthaltsdauer ohne Spiegelungen angibt.
Infolge der Resonatorverluste klingt die im Resonator enthaltene Energie $W$ ab. Es ergibt sich

$$\frac{\Delta W}{\Delta t} = -\frac{Wd}{2L}\,c \quad \text{bzw.} \quad \frac{\mathrm{d}W}{\mathrm{d}t} = -\frac{W}{T}. \tag{3}$$

Diese Differentialgleichung hat die Lösung

$$W(t) = W_0\,\mathrm{e}^{-\frac{t}{T}}. \tag{4}$$

**Beispiel 8.2.2. Offener Resonator aus zwei ebenen Spiegeln**

Für $L = 30$ cm und $d = 0{,}04$ für einen der beiden Spiegel folgt

$$T = \frac{2 \cdot 0{,}30\ \mathrm{s}}{3 \cdot 10^8 \cdot 0{,}04} = 50\ \mathrm{ns} = 5 \cdot 10^{-8}\ \mathrm{s}$$

als mittlere Aufenthaltsdauer eines Photons, wenn Beugungsverluste vernachlässigt werden können.

*Verluste des Resonators — Gütefaktor*

Die Verluste des Resonators werden zusammengefaßt und durch den **Gütefaktor** $Q$ charakterisiert. Er gibt das Verhältnis zwischen dem $2\pi$-fachen des Energieinhaltes $W$ und der während einer Periode verlorenen Energie

$$W_\mathrm{V} = \frac{P_\mathrm{V}}{f} \tag{5}$$

an:

$$Q = 2\pi\,\frac{W}{W_\mathrm{V}} = \omega\,\frac{W}{P_\mathrm{V}}. \tag{6}$$

Hieraus folgt

$$\frac{\mathrm{d}W}{\mathrm{d}t} = -\frac{\omega}{Q}\,W \tag{7}$$

mit der Lösung

$$W = W_0\,\mathrm{e}^{-\frac{\omega}{Q}t}. \tag{8}$$

Zwischen mittlerer Aufenthaltsdauer und Gütefaktor besteht der Zusammenhang

$$\frac{\omega}{Q} = \frac{1}{T}. \tag{9}$$

Bezeichnet $N$ die Dichte der Photonen innerhalb des Bereiches $\Delta f$ einer Spektrallinie, $V$ das Volumen des aktiven Mediums, so gehen je Sekunde

$$\frac{NVP_V}{W} = \frac{NV}{T} \tag{10}$$

Teilchen verloren, die durch Strahlungsinduktion wieder erzeugt werden müssen. In der Lasertechnik werden im allgemeinen Resonatoren mit **gekrümmten Spiegeln** verwendet, die die Güte und Justiergenauigkeit von Resonatoren mit ebenen Spiegeln weit übertreffen und damit eine große Energiedichte ermöglichen.

**Beispiel 8.2.3. Gütefaktor, Energiedichte, Photonenzahl**

Ein Resonator habe für Photonen der Frequenz $f = 5 \cdot 10^{14}$ Hz den Gütefaktor $Q = 3 \cdot 10^{11}$. Die mittlere Aufenthaltsdauer dieser Photonen beträgt nach (9)

$$T = \frac{Q}{2\pi f} = \frac{3 \cdot 10^{11}}{2 \cdot 3 \cdot 5 \cdot 10^{14}}\,\text{s} = 10^{-4}\,\text{s}.$$

Das kann so aufgefaßt werden, als ob die Photonen in Impulsen von $10^{-4}$ s Dauer ausgestoßen und danach durch neue ersetzt werden. Wird $p = 0{,}01 = 1\%$ der Energie in Laserstrahlung umgesetzt und beträgt die Ausgangsleistung $\dot{W} = 100$ W, so erhält man für die Energie im Resonatorraum

$$W = \frac{\dot{W}T}{P} = \frac{100}{0{,}01}\,10^{-4}\,\text{J} = 1{,}0\,\text{J}.$$

Für $V = 10\,\text{cm}^3$ und die Linienbreite $\Delta f = 10^6$ Hz erhält man als Energiedichte

$$\varrho = \frac{W}{V} = \frac{1{,}0}{10^{-5}}\,\text{J m}^{-3} = 10^5\,\text{J m}^{-3}$$

und als spektrale Energiedichte

$$\varrho_f = \frac{\varrho}{\Delta f} = \frac{10^5}{10^6}\,\text{J s m}^{-3} = 0{,}1\,\text{J s m}^{-3}.$$

Die Konzentration der Photonen beträgt

$$N = \frac{\varrho}{hf} = \frac{10^5}{6{,}6 \cdot 10^{-34} \cdot 5 \cdot 10^{14}}\,\text{m}^{-3} = 3 \cdot 10^{23}\,\text{m}^{-3}.$$

*Frequenzselektive Elemente*

Um eine Strahlung großer Bündelungsschärfe zu erzielen, regt man nur wenige Wellenmoden, d. h. nur wenige der Eigenschwingungen des Resonators an. Sie werden durch zusätzliche frequenzselektive Elemente so ausgezeichnet, daß nur geringe Strahlungsverluste auftreten. Das geschieht z. B., indem an den eigentlichen Laser-

resonator ein Nebenresonator angekoppelt wird, dessen Eigenschwingungen einen großen Frequenzabstand besitzen. Der Laserbetrieb erfolgt auf den wenigen Moden, für die beide Resonatoren in Resonanz sind.
Auch frequenzselektive Absorber werden technisch angewandt.



## Probleme

### 8.2.1. Offener optischer Resonator mit planparallelen Spiegeln

Ein optischer Resonator werde von zwei zueinander parallelen Spiegeln gebildet. Einer von diesen sei lichtundurchlässig, der andere besitze für den senkrecht auftreffenden Strahl die Durchlässigkeit $d = 0{,}02$.
Zur größenordnungsmäßigen Abschätzung wird das folgende Modell zugrunde gelegt: Die an den Spiegeln reflektierten Photonen liefern nur dann einen Beitrag zum induzierenden Feld,

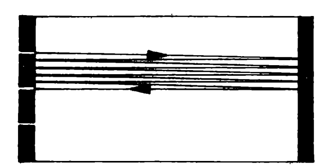


Bild 8.2.4. Weg eines Photons während der mittleren Aufenthaltsdauer im Resonator

wenn sie während der mittleren Aufenthaltsdauer $T$ ständig im Resonatorraum verbleiben und nicht auf eine der Seitenwände treffen (vgl. Bild 8.2.4). Dagegen bleiben Photonen, die vorzeitig den Resonator verlassen, unberücksichtigt.
Untersuchen Sie das Verhalten der Photonen im offenen Resonator, und bestimmen Sie die ungedämpften Eigenschwingungen. In welchem Abstand treten die Resonanzlinien auf, über welchen Wellenlängenbereich sind sie aufgespalten?
Der offene Resonator habe die Länge $L = 9$ cm. Die Spiegelabmessungen seien $a = 5$ mm, $b = 2{,}5$ mm. Das untersuchte Frequenzband liege bei $f_0 = 5 \cdot 10^{14}$ Hz ($\lambda = 0{,}6$ µm).

**Lösung:**

Nach (8.2./2) beträgt die mittlere Aufenthaltsdauer

$$T = \frac{2L}{cd}. \tag{1}$$

In einem allseitig geschlossenen Resonatorraum mit idealleitenden Wänden ergibt sich als Lösung der Wellengleichung und der Randbedingung, daß die Tangentialkomponente des elektrischen Feldes an der Grenze zwischen Hohlraum und Metall verschwinden muß:

$$\left.\begin{aligned} E_x &= E_{x0} \cos k_x x \sin k_y y \sin k_z z \, \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega t}, \\ E_y &= E_{y0} \sin k_x x \cos k_y y \sin k_z z \, \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega t}, \\ E_z &= E_{z0} \sin k_x x \sin k_y y \cos k_z z \, \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega t} \end{aligned}\right\} \tag{2}$$

(vgl. [4] 5.3.5/10). Darin ist die $z$-Achse mit der durch den Mittelpunkt der beiden Spiegel hindurchgehenden Resonatorachse identisch. Die Komponenten des Wellenzahlvektors $\boldsymbol{k}$ sind durch

$$k_x = \frac{n_x \pi}{a}, \qquad k_y = \frac{n_y \pi}{b}, \qquad k_z = \frac{n_z \pi}{L} \tag{3}$$

gegeben, wobei $n_x$, $n_y$, $n_z$ unabhängig voneinander den Wertevorrat der ganzen Zahlen durchlaufen.
Für die Wellenlängen der Eigenschwingungen folgt (vgl. [4] 5.3.5.)

$$\lambda = \lambda^{n_x, n_y, n_z} = \frac{2\pi}{k} = \frac{2}{\sqrt{\frac{n_x^2}{a^2} + \frac{n_y^2}{b^2} + \frac{n_z^2}{L^2}}}. \tag{4}$$

Die hin- und herlaufenden Photonen dürfen nur wenig gegen die Resonatorachse geneigt sein. Das bedeutet

$$k_x,\, k_y \ll k_z \qquad \text{bzw.} \qquad n_x,\, n_y \ll n_z. \tag{5}$$

Daraus erhält man genähert nach (3)

$$\left.\begin{aligned} \cos(\boldsymbol{k}, \boldsymbol{x}) &= \frac{k_x}{k_z} = \frac{n_x}{n_z}\frac{L}{a} = n_x \frac{\lambda}{2a}, \\ \cos(\boldsymbol{k}, \boldsymbol{y}) &= \frac{k_y}{k_z} = \frac{n_y}{n_z}\frac{L}{b} = n_y \frac{\lambda}{2b} \end{aligned}\right\} \tag{6}$$

mit

$$\lambda = \frac{2L}{n_z}, \tag{7}$$

während für $\cos(\boldsymbol{k}, \boldsymbol{z})$ der Wert eins gesetzt werden kann.
Wir wählen den Mittelpunkt des einen Spiegels als Koordinatenanfangspunkt. Der von hier ausgehende Strahl trifft den gegenüberliegenden Spiegel in $P_1(x_1, y_1, L)$ mit

$$x_1 = n_x \frac{\lambda L}{2a}, \qquad y_1 = n_y \frac{\lambda L}{2b}. \tag{8}$$

In der Zeit $T$ durchläuft das Photon den Resonator $\frac{cT}{L}$-mal und befindet sich danach im Punkt $P(x_0, y_0, z_0)$ mit den Koordinaten

$$x_0 = n_x \frac{\lambda}{2a}\frac{L}{d}, \qquad y_0 = n_y \frac{\lambda}{2b}\frac{L}{d}. \tag{9}$$

Die Bedingung, daß das Photon während der Zeit $T$ im Resonator verbleibt, bedeutet

$$x_0 < \frac{a}{2}, \qquad y_0 < \frac{b}{2}. \tag{10}$$

Setzt man (9) in (10) ein, erhält man

$$n_x < \frac{a^2 d}{\lambda L}, \qquad n_y < \frac{b^2 d}{\lambda L}. \tag{11}$$

Im offenen Resonator ist hiernach die Zahl der Eigenschwingungen gegenüber dem geschlossenen stark eingeschränkt. Für die Wellenlängen der Eigenschwingungen folgt aus (4) durch Reihenentwicklung

$$\lambda = \frac{2L}{n_z}\left[1 - \frac{1}{2}\left(\frac{n_x}{n_z}\frac{L}{a}\right)^2 - \frac{1}{2}\left(\frac{n_y}{n_z}\frac{L}{b}\right)^2\right]. \tag{12}$$

Mit den vorgegebenen Zahlen erhalten wir aus (7)

$$n_z = \frac{2 \cdot 0{,}09\ \mathrm{m}}{0{,}6 \cdot 10^{-6}\ \mathrm{m}} = 3 \cdot 10^5$$

und aus (11)

$$n_x = \frac{(5 \cdot 10^{-3})^2 \cdot 0{,}02\ \mathrm{m}^2}{0{,}6 \cdot 10^{-6} \cdot 0{,}09\ \mathrm{m}^2} < 9, \qquad n_y < 3.$$

Ändert sich $n_z$ um 1, so wird nach (7) die Eigenwellenlänge um

$$\delta\lambda = -\frac{\lambda}{n_z}\Delta n_z, \qquad \text{d. h.} \qquad \delta\lambda = \frac{0{,}6 \cdot 10^{-6}}{3 \cdot 10^5}\ \mathrm{m} = 2 \cdot 10^{-12}\ \mathrm{m}$$

verändert. Die größte noch zulässige Wellenlängenabweichung zur Eigenschwingung $n_z = 3 \cdot 10^5$ erhält man für $n_x = 8$, $n_y = 2$:

$$\Delta\lambda = \frac{0{,}09}{3 \cdot 10^5}\left[\left(\frac{8}{3 \cdot 10^5}\,\frac{0{,}09}{0{,}005}\right)^2 + \left(\frac{2}{3 \cdot 10^5}\,\frac{0{,}09}{0{,}0025}\right)^2\right]\mathrm{m} = 0{,}9 \cdot 10^{-13}\ \mathrm{m}.$$

Jede der im Abstand $2 \cdot 10^{-12}$ m möglichen Linien zeigt somit eine Aufspaltung, die nicht über den Wellenlängenbereich $0{,}09 \cdot 10^{-12}$ m hinausgeht.

### 8.2.2. Anschwingbedingung für den Laser-Oszillator

Beim Anschwingen des Lasers wird zunächst mit Hilfe des Pumpens die Konzentration im oberen Laserniveau über das thermische Gleichgewicht hinaus vergrößert. Wenn die Erzeugerrate der Photonen die Verlustrate übersteigt, wird der Laserverstärker infolge der Rückkopplung zu einem Oszillator mit Selbsterregung.
Bei einem Rubinlaser sei die mittlere Aufenthaltsdauer $T = 50$ ns. Der EINSTEIN-Koeffizient für die induzierte Emission habe in dem betrachteten Wellenlängenbereich die Größe $B_f = 2{,}8 \cdot 10^{-16}\ \mathrm{m^3\,s^{-1}}$. Das Volumen des aktiven Mediums betrage $V = 5\ \mathrm{cm^3}$. Wie groß muß die Besetzungsdifferenz sein, wenn die Rückkopplung des Laserverstärkers zur Selbsterregung führen soll?

**Lösung:**

Wir rechnen näherungsweise mit einer gleichmäßigen Verteilung der Quanten über den Frequenzbereich $\Delta f$ der Spektrallinie. Für die Konzentration der Photonen im Resonatorraum muß nach (8.1.3./6) die Differentialgleichung

$$\left(\frac{\mathrm{d}N}{\mathrm{d}t}\right)_{\mathrm{Ind}} = n_\mathrm{p} B_f N \tag{1}$$

gelten; d. h., je Sekunde werden, bezogen auf die Einheit des aktiven Mediums, $n_\mathrm{p} B_f N$ Photonen erzeugt.
Infolge der Verluste im Resonator gehen Photonen verloren. Die Anzahl, bezogen auf die Einheit des aktiven Mediums, beträgt

$$\left(\frac{\mathrm{d}N}{\mathrm{d}t}\right)_{\mathrm{Verl}} = -\frac{N}{T}. \tag{2}$$

Sollen die Resonatorverluste durch die erzeugten Photonen gedeckt und soll damit der Resonator zur Schwingung angeregt werden, so muß

$$\left(\frac{\mathrm{d}N}{\mathrm{d}t}\right)_{\mathrm{Ind}} + \left(\frac{\mathrm{d}N}{\mathrm{d}t}\right)_{\mathrm{Verl}} \geqq 0 \tag{3}$$

bzw.

$$\boxed{n_{\mathrm{p}} \geqq \frac{1}{TB_f}} \tag{4}$$

erfüllt sein. (4) heißt **Schwellenwertbedingung**, da sie eine Schwelle für die erforderliche Besetzungsumkehr festlegt.
Im vorliegenden Fall ist durch das Pumpen zumindest die Besetzungsumkehr

$$n_{\mathrm{p}} = \frac{1}{5 \cdot 10^{-8} \cdot 2{,}8 \cdot 10^{-16}}\ \mathrm{m}^{-3} = 7{,}1 \cdot 10^{22}\ \mathrm{m}^{-3}$$

zu erzeugen. Die Anzahl der Atome im oberen Niveau muß die im unteren um

$$n_{\mathrm{p}}V = 7{,}1 \cdot 10^{22} \cdot 5 \cdot 10^{-6} = 3{,}6 \cdot 10^{17}$$

übersteigen.

### 8.2.3. Pumpleistung und Pumprate

Der Rubinlaser enthält als aktives Material $Cr^{3+}$-Ionen in $Al_2O_3$. Bei Zimmertemperatur ergibt sich der günstigste Schwellenwert, wenn der Anteil der Chromatome $p = 0{,}035\%$ beträgt. Die Wellenlänge der Pumpstrahlung liegt bei $\lambda_{\mathrm{p}} = 550$ nm. Berechnen Sie die erforderliche Pumpleistung für ein aktives Lasermedium mit $V = 5$ cm³. Wie groß muß die mittlere Erzeugerrate bzw. Pumprate $R$ sein, d. i. die Anzahl der in den angeregten Zustand versetzten Atome je Raum- und Zeiteinheit? Rubin hat die relative Molekülmasse $M = 101{,}94$; seine Dichte beträgt $d = 3{,}98$ g cm$^{-3}$.

**Lösung:**

Es bezeichne $m = Vd$ die Masse des Laserkristalls, $pm$ die gesamte Masse der aktiven Atome. Für ihre Anzahl ergibt sich

$$nV = \frac{N_{\mathrm{A}}pd}{M}\,V. \tag{1}$$

Mit den vorgegebenen Werten erhalten wir aus (1)

$$n = \frac{6{,}02 \cdot 10^{26} \cdot 3{,}5 \cdot 10^{-4} \cdot 3{,}98 \cdot 10^{3}}{101{,}94}\ \mathrm{m}^{-3} = 8{,}6 \cdot 10^{24}\ \mathrm{m}^{-3}.$$

$n$ ist groß gegen $n_{\mathrm{p}}$ nach (8.2.2./4). Bezeichnen $n_1$ und $n_2$ die Besetzung des unteren bzw. oberen Niveaus, so muß

$$n_1 + n_2 = n, \qquad n_2 - n_1 = n_{\mathrm{p}} \tag{2}$$

gelten. Hieraus ergibt sich

$$n_2 = \frac{n + n_{\mathrm{p}}}{2}, \qquad n_1 = \frac{n - n_{\mathrm{p}}}{2} \tag{3}$$

und angenähert für $n \gg n_P$

$$n_2 = n_1 = \frac{n}{2}. \tag{4}$$

Vernachlässigt man wegen der großen Energielücke die Besetzung im thermischen Gleichgewicht, so müssen nach (4)

$$\frac{n}{2} V = 4{,}3 \cdot 10^{24} \cdot 5 \cdot 10^{-6} = 2{,}2 \cdot 10^{19}$$

Atome auf das Anregungsniveau gepumpt werden. Die erforderliche Energie muß während der mittleren Lebensdauer $\tau = 3$ ms aufgebracht werden. Für ein Atom ist die erforderliche Energie durch

$$hf_P = \frac{hc}{\lambda_P} \tag{5}$$

gegeben. Die aufzuwendende Pumpleistung beträgt

$$\dot{W}_P = \frac{n}{2} V \frac{hc}{\lambda_P \tau} = \frac{hcN_A pdV}{2M\lambda_P \tau}. \tag{6}$$

Mit den vorgegebenen Werten folgt

$$\dot{W}_P = \frac{6{,}63 \cdot 10^{-34} \cdot 3 \cdot 10^8 \cdot 2{,}2 \cdot 10^{19}}{0{,}55 \cdot 10^{-6} \cdot 3 \cdot 10^{-3}} \text{ W} = 2{,}65 \text{ kW}.$$

Für die Pumprate erhält man

$$R = \frac{n}{2\tau}, \tag{7}$$

$$R = \frac{4{,}3 \cdot 10^{24}}{3 \cdot 10^{-3}} \text{ m}^{-3}\text{ s}^{-1} = 1{,}4 \cdot 10^{27} \text{ m}^{-3}\text{ s}^{-1}.$$

### 8.2.4. Die Bilanzgleichung und ihre Lösung für den stationären Betrieb

Die Eigenschaften des Lasers werden durch die Konzentration $N$ der Photonen des Strahlungsfeldes sowie durch die Besetzungsdichten $n_1$ und $n_2$ der beteiligten Energieniveaus $W_1$ und $W_2$ bestimmt. Stellen Sie das System der Gleichungen unter Berücksichtigung des Pumpens und der Übergänge zwischen den Energieniveaus auf. Untersuchen Sie speziell den stationären Fall.

Für das aktive Medium eines Festkörperlasers sei $A_{21} = 2 \cdot 10^3 \text{ s}^{-1}$, $B_f = 1{,}2 \cdot 10^{-16} \text{ m}^3 \text{ s}^{-1}$, die Konzentration der aktiven Atome $n = 5 \cdot 10^{23} \text{ m}^{-3}$. Die mittlere Aufenthaltsdauer im Resonator betrage $T = 45$ ns. Für die Häufigkeit des Überganges aus dem unteren Laserniveau $W_1$ in ein am Laserprozeß nicht beteiligtes Niveau gelte $\gamma_1 = 10^6 \text{ s}^{-1}$, für den Übergang aus $W_2$ $\gamma_2 = 10^2 \text{ s}^{-1}$.

Bestimmen Sie unter der Voraussetzung, daß das Pumpen auf die Teilchenkonzentration im unteren Niveau keinen Einfluß hat, die Pumprate $R_2$ sowie die maximal mögliche Photonenkonzentration. Welche maximale Ausgangsleistung erhält man für ein aktives Lasermedium mit $V = 5 \text{ cm}^3$, wenn 10% des Strahlungsfeldes genutzt werden? Die Frequenz sei $f = 5 \cdot 10^{14}$ Hz.

**Lösung:**

Durch das Pumpen erhöhen sich die Besetzungsdichten:

$$\left(\frac{\mathrm{d}n_i}{\mathrm{d}t}\right)_{\text{Pumpen}} = R_i \qquad (i = 1, 2). \tag{1}$$

Nach (8.1.3./6) rechnen wir genähert mit

$$\left(\frac{\mathrm{d}\varrho}{\mathrm{d}t}\right)_{1,2} = n_\mathrm{p} B_f \varrho \tag{2}$$

und der für die Energiedichte gültigen Beziehung

$$\varrho = Nhf. \tag{3}$$

Daraus folgt

$$\left(\frac{\mathrm{d}N}{\mathrm{d}t}\right)_{1,2} = n_\mathrm{p} B_f N = (n_2 - n_1)\, B_f N. \tag{4}$$

Da für Übergänge $W_2 \to W_1$ Photonen emittiert, für $W_1 \to W_2$ absorbiert werden, folgt

$$\left(\frac{\mathrm{d}n_2}{\mathrm{d}t}\right)_{1,2} = -\left(\frac{\mathrm{d}n_1}{\mathrm{d}t}\right)_{1,2} = -\left(\frac{\mathrm{d}N}{\mathrm{d}t}\right)_{1,2}. \tag{5}$$

**Spontane Emission** ist durch

$$\left(\frac{\mathrm{d}n_2}{\mathrm{d}t}\right)_{\mathrm{sp}} = -\left(\frac{\mathrm{d}n_1}{\mathrm{d}t}\right)_{\mathrm{sp}} = n_2 A_{21} \tag{6}$$

gekennzeichnet. Sie verstärkt das Feld der Laserstrahlung nicht.
**Relaxationsprozesse** sind Übergänge zwischen einem Laserniveau und einem am Laserprozeß nicht beteiligten Energieniveau. Für diese gilt

$$\frac{\mathrm{d}n_i}{\mathrm{d}t} = -\gamma_1 n_i \qquad (i = 1, 2). \tag{7}$$

Die **Resonatorverluste** folgen auf Grund von

$$\left(\frac{\mathrm{d}N}{\mathrm{d}t}\right)_{\mathrm{Verl}} = -\frac{N}{T}. \tag{8}$$

Zusammengefaßt ergeben sich die drei Gleichungen

$$\frac{\mathrm{d}n_2}{\mathrm{d}t} = R_2 - (n_2 - n_1)\, B_f N - n_2 A_{21} - n_2 \gamma_2, \tag{9}$$

$$\frac{\mathrm{d}n_1}{\mathrm{d}t} = R_1 + (n_2 - n_1)\, B_f N + n_2 A_{21} - n_1 \gamma_1, \tag{10}$$

$$\frac{\mathrm{d}N}{\mathrm{d}t} = (n_2 - n_1)\, B_f N - \frac{N}{T}. \tag{11}$$

$R_1$ und $R_2$ hängen voneinander ab. Vielfach kann $R_1$ vernachlässigt werden.

Im **stationären Fall** sind $n_1$, $n_2$, $N$ konstant. Damit folgt aus (11)

$$n_2 - n_1 = n_p = \frac{1}{TB_f} \tag{12}$$

(vgl. 8.2.2./4). Die für den stationären Betrieb erforderliche Überbesetzung hängt somit vom Resonator und vom aktiven Medium, nicht jedoch von der Pumpleistung ab.
Durch Addition von (9) und (10) folgt im stationären Fall

$$R_1 + R_2 \doteq n_1\gamma_1 + n_2\gamma_2. \tag{13}$$

Die Pumpleistung deckt somit gerade die Verluste durch Relaxation. Aus (12) und (13) erhält man durch Auflösen nach $n_1$ und $n_2$

$$n_1 = \frac{R_1 + R_2 - n_p\gamma_2}{\gamma_1 + \gamma_2}, \qquad n_2 = \frac{R_1 + R_2 + n_p\gamma_1}{\gamma_1 + \gamma_2}. \tag{14}$$

Wir setzen die rechten Seiten von (9) und (10) gleich, berücksichtigen (14) und lösen nach der Besetzungsdifferenz $n_p$ auf:

$$n_p = \frac{R_2(\gamma_1 - A_{21}) - R_1(\gamma_2 + A_{21})}{B_f N(\gamma_1 + \gamma_2) + \gamma_1(\gamma_2 + A_{21})}. \tag{15}$$

Aus der Forderung $n_p > 0$ ergibt sich

$$\gamma_1 > A_{21} \tag{16}$$

als Bedingung für den stationären Laserbetrieb: Das untere Laserband muß durch Relaxationsvorgänge stärker entleert werden, als es durch spontane Emission aufgefüllt wird.
Um die Photonenkonzentration zu bestimmen, setzen wir (12) und (15) gleich. Durch Auflösen nach $N$ ergibt sich

$$N = \frac{R_2(\gamma_1 - A_{21}) - R_1(\gamma_2 + A_{21})}{\gamma_1 + \gamma_2} T - \frac{\gamma_1(\gamma_2 + A_{21})}{B_f(\gamma_1 + \gamma_2)}. \tag{17}$$

$N$ wächst mit zunehmender mittlerer Aufenthaltsdauer $T$ und mit der Pumpleistung. Für diese erhält man wegen $N > 0$ als Minimalbedingung (**Laserbedingung**)

$$\boxed{\frac{R_2(\gamma_1 - A_{21}) - R_1(\gamma_2 + A_{21})}{\gamma_1(\gamma_2 + A_{21})} \geqq \frac{1}{TB_f}}. \tag{18}$$

Die Pumprate $R_2$ muß hiernach um so größer sein, je kürzer die mittlere Aufenthaltsdauer $T$ ist.
Aus dem Vergleich von (18) und (15) geht hervor, daß die linke Seite der Laserbedingung die Besetzungsdifferenz bei abgeschaltetem Strahlungsfeld $N = 0$ kennzeichnet:

$$n_p(0) = n_{p0} = \frac{R_2(\gamma_1 - A_{21}) - R_1(\gamma_2 + A_{21})}{\gamma_1(\gamma_2 + A_{21})}. \tag{19}$$

Dieses Abschalten des Strahlungsfeldes kann z. B. durch Unterbrechung des Strahlenganges im Innern des Resonators mittels absorbierender Platten oder durch Entfernung der Reflektorspiegel realisiert werden.
Die Laserbedingung kann nach Definition von $n_{p0}$ auch in der Form

$$n_{p0} \geqq n_p = \frac{1}{TB_f} \tag{20}$$

geschrieben werden. Zur Erzeugung einer stationären Laserstrahlung muß hiernach so stark gepumpt werden, daß die Inversion bei abgeschaltetem Strahlungsfeld größer ist als die für den stationären Betrieb mit Strahlungsfeld.
Mit Hilfe von $n_{p0}$ läßt sich die mittlere Dichte der Quanten des Laserstrahlungsfeldes in der Form

$$N = \frac{\gamma_1(\gamma_2 + A_{21})}{B_f(\gamma_1 + \gamma_2)} (B_f T n_{p0} - 1) \tag{21}$$

schreiben.
$n_{p0}$ hängt von der Pumpleistung ab. Diese bestimmt daher die Intensität des Strahlungsfeldes und neben anderen Parametern die Ausgangsleistung. Da $n_{p0}$ nicht über $n$ hinaus anwachsen kann, erhält man als Maximalwert der Photonendichte

$$N_{\max} = \frac{\gamma_1(\gamma_2 + A_{21})}{B_f(\gamma_1 + \gamma_2)} (B_f T n - 1). \tag{22}$$

Durch Auflösen von (18) nach $R_2$ folgt mit den vorgegebenen Werten

$$R_2 \geqq \frac{\gamma_1(\gamma_2 + A_{21})}{T B_f(\gamma_1 - A_{21})} = \frac{10^6(10^2 + 2 \cdot 10^3)}{4{,}5 \cdot 10^{-8} \cdot 1{,}2 \cdot 10^{-16}(10^6 - 2 \cdot 10^3)} \mathrm{s^{-1}\,m^{-3}}$$
$$= 3{,}9 \cdot 10^{26}\,\mathrm{s^{-1}\,m^{-3}}.$$

Aus (22) erhält man

$$N_{\max} = \frac{10^6(10^2 + 2 \cdot 10^3)}{1{,}2 \cdot 10^{-16}(10^6 + 2 \cdot 10^3)} (1{,}2 \cdot 10^{-16} \cdot 4{,}5 \cdot 10^{-8} \cdot 5 \cdot 10^{23} - 1)\,\mathrm{m^{-3}}$$
$$= 3 \cdot 10^{19}\,\mathrm{m^{-3}},$$

für die gespeicherte Energie somit

$$N_{\max} V h f = 3 \cdot 10^{19} \cdot 5 \cdot 10^{-6} \cdot 6{,}6 \cdot 10^{-34} \cdot 5 \cdot 10^{14}\,\mathrm{J} = 5 \cdot 10^{-5}\,\mathrm{J}.$$

Als maximale Ausgangsleistung ergibt sich

$$\frac{0{,}10 N_{\max} V h f}{T} = \frac{0{,}1 \cdot 5 \cdot 10^{-5}}{4{,}5 \cdot 10^{-8}}\,\mathrm{W} = 110\,\mathrm{W}.$$

## 8.2.5. Stabilität der Laserschwingungen

Beim Festkörperlaser ist die Verstärkung so groß, daß die induzierte Emission zum Abbau der Besetzungsinversion führt. Hierdurch wird die Ausstrahlung reduziert, bis der Aufbau einer neuen Besetzungsinversion wieder zur verstärkten induzierten Emission führt. Der Festkörperlaser strahlt daher in Form einzelner Lichtblitze („spikes").
In erster Näherung kann man davon ausgehen, daß während der Anschwingprozesse die Besetzungsinversion $n_p$ klein gegen die Anzahl $n$ der am Laserprozeß beteiligten Atome ist. Die mittlere Aufenthaltsdauer im Pumpniveau $W_3$ sei gegen die Verweilzeiten in den Laserniveaus $W_1$ und $W_2$ zu vernachlässigen und die Pumpleistung so stark, daß sich alle laseraktiven Atome in den Zuständen $W_1$ und $W_2$ befinden. Die Relaxationsübergänge können unter diesen Voraussetzungen vernachlässigt werden.
Untersuchen Sie den Einfluß einer schwachen Störung auf den Laserprozeß, wenn dieser durch die Besetzungsdifferenz $n_p = 1{,}5 \cdot 10^{22}\,\mathrm{m^{-3}}$, die Photonendichte $N = 4{,}5 \cdot 10^{18}\,\mathrm{m^{-3}}$ und die mittlere Aufenthaltsdauer im Resonator $T = 200$ ns gekennzeichnet ist. Wie rasch klingen die Störungen $\Delta n_p = -5 \cdot 10^{21}\,\mathrm{m^{-3}}$, $\Delta N = -2{,}5 \cdot 10^{18}\,\mathrm{m^{-3}}$ ab?

**Lösung:**

Es gilt

$$n_1 + n_2 = n, \qquad R_2 = -R_1 = R. \tag{1}$$

Für die Konzentrationsänderung durch spontane Emission folgt angenähert unter der Voraussetzung $n_p \ll n$

$$\left(\frac{dn_2}{dt}\right)_{sp} = -\left(\frac{dn_1}{dt}\right)_{sp} = -\frac{n}{2} A_{21}. \tag{2}$$

Damit ergibt sich aus den beiden Bilanzgleichungen (8.2.4./9) und (8.2.4./10)

$$\frac{dn_2}{dt} = R - n_p B_f N - \frac{n}{2} A_{21}, \tag{3}$$

$$\frac{dn_1}{dt} = -R + n_p B_f N + \frac{n}{2} A_{21}. \tag{4}$$

Aus (3) und (4) erhalten wir durch Subtraktion

$$\frac{dn_p}{dt} = 2R - nA_{21} - 2n_p B_f N. \tag{5}$$

Die Photonenkonzentration geht aus (8.2.2./1) und (8.2.2./2) hervor:

$$\frac{dN}{dt} = n_p B_f N - \frac{N}{T}. \tag{6}$$

In (5) können die ersten beiden Summanden zu einer Konstanten

$$A = 2R - nA_{21} \tag{7}$$

zusammengefaßt werden.
Wir betrachten kleine Schwankungen um die Gleichgewichtslage

$$\hat{n}_p = \frac{1}{B_f T}, \tag{8}$$

$$\hat{N} = \frac{A}{2B_f \hat{n}_p} = \frac{AT}{2}, \tag{9}$$

schreiben also

$$n_p = \hat{n}_p + \Delta n_p, \qquad N = \hat{N} + \Delta N. \tag{10}$$

Hierfür ergeben sich aus (5) und (6) die Differentialgleichungen

$$\frac{d\Delta n_p}{dt} = -2\hat{n}_p B_f \, \Delta N - 2B_f \hat{N} \, \Delta n_p, \tag{11}$$

$$\frac{d\Delta N}{dt} = B_f \hat{N} \, \Delta n_p. \tag{12}$$

Ihre Lösungen lauten

$$\Delta n_p = \Delta n_{p0} \, e^{\alpha t}, \qquad \Delta N = \Delta N_0 \, e^{\alpha t} \tag{13}$$

mit

$$\alpha = B_f\hat{N}\left(-1 \pm \sqrt{1 - 2\frac{\hat{n}_p}{\hat{N}}}\right). \tag{14}$$

Bei kleinen Resonatorverlusten und großer Pumpleistung ist

$$\hat{n}_p \gg \hat{N}, \tag{15}$$

so daß angenähert

$$\alpha = -B_f N \pm \mathrm{i} B_f \sqrt{2N\hat{n}_p} \tag{16}$$

folgt. Hierin hat der Kehrwert des ersten Summanden die Bedeutung einer Abklingzeit

$$t_0 = \frac{1}{B_f\hat{N}} = \frac{\hat{n}_p T}{\hat{N}}, \tag{17}$$

während der Kehrwert des zweiten eine Periode

$$\tau = \frac{2\pi}{\sqrt{AB_f}} = \frac{2\pi T}{\sqrt{2\hat{N}}}\sqrt{\hat{n}_p} \tag{18}$$

kennzeichnet. Man kann daher

$$\alpha = -\frac{1}{t_0} \pm \frac{2\pi\mathrm{i}}{\tau} \tag{19}$$

schreiben. Kleine Abweichungen klingen hiernach in der Zeit $t_0$ auf den e-ten Teil ab. Das System ist stabil. Dem Dämpfungsprozeß ist eine Schwingung mit der Periode $\tau$ überlagert. Die Schwingung heißt **Relaxationsschwingung**.
Im vorliegenden Fall können die Abweichungen noch als klein angesehen werden, und es folgt

$$t_0 = \frac{1{,}5 \cdot 10^{22} \cdot 2 \cdot 10^{-7}}{4{,}5 \cdot 10^{18}}\,\mathrm{s} = 670\,\mu\mathrm{s},$$

$$\tau = \frac{2 \cdot 3{,}14 \cdot 2 \cdot 10^{-7}}{\sqrt{2 \cdot 4{,}5 \cdot 10^{18}}}\sqrt{1{,}5 \cdot 10^{22}}\,\mathrm{s} = 51\,\mu\mathrm{s}.$$

### 8.2.6. Gesteuerte Laser

Bei der Plasmaerzeugung oder bei der Auslösung thermonuklearer Reaktionen ist es erforderlich, große Intensitäten der Ausgangsleistung zu erzielen. Hierzu wird die Länge eines Laserimpulses, d. h. die Zeit der Ausstrahlung des Impulses, auf einen Abschnitt kurzer Dauer herabgesetzt. Das läßt sich erreichen, indem die Aufenthaltszeit $T$ der Photonen im Resonator gesteuert wird:

$$T = T(t) \qquad \text{bzw.} \qquad Q = Q(t).$$

Das geschieht durch eine **Kerr-Zelle** (vgl. A 3.2.14.).
Solange das elektrische Feld der Kerr-Zelle eingeschaltet ist, wird das aus dem Lasermedium kommende Licht durch die Wirkung des Polarisators beseitigt. Erst nach Ausschalten der Kerr-Zelle, was mit einer Schaltzeit von $10^{-8}$ s geschieht, wirkt die Anordnung als Resonator. Die Rückkopplung der Lichtwelle mit dem Resonator läßt sich daher für extrem kurze Zeit herstellen (vgl. Bild 8.2.5).

In einem Festkörperlaser sei die Besetzungsinversion $n_\mathrm{p}$ erzeugt und danach durch Kurzzeitschaltung der KERR-Zelle ein Resonator mit der Aufenthaltszeit $T = 50$ ns hergestellt worden. Es sei $B_f = 4 \cdot 10^{-17}\ \mathrm{m^3\,s^{-1}}$, $n_{\mathrm{p}0} = 2 \cdot 10^{24}\ \mathrm{m^{-3}}$, $f = 4{,}32 \cdot 10^{14}$ Hz, $V = 10\ \mathrm{cm^3}$. Berechnen Sie, welcher Anteil der Besetzungsinversion bei der Ausstrahlung des Riesenimpulses abgebaut wird und welche maximale Photonendichte im Resonator auftritt. Wie groß ist die Halbwertbreite bei der Ausstrahlung, wenn die Photonendichte durch eine GAUSS-Kurve angenähert wird? Bestimmen Sie daraus die Ausgangsleistung, gemittelt über die Halbwertbreite des Impulses.

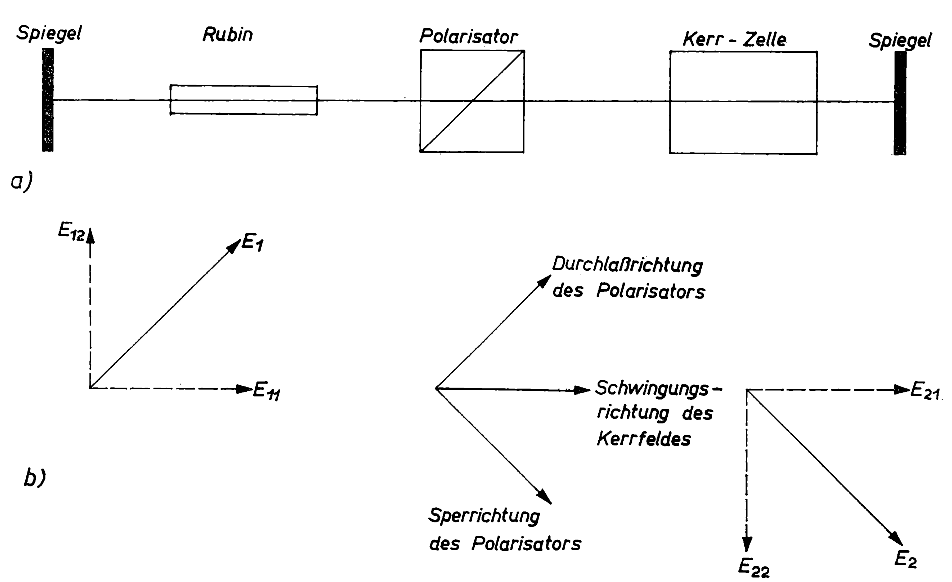



Bild 8.2.5. Gesteuerte Laser.
a) Prinzipieller Aufbau, b) elektrischer Vektor $\boldsymbol{E}_1$ des Laserlichtes beim Eintritt und $\boldsymbol{E}_2$ nach zweimaligem Passieren der KERR-Zelle

**Lösung:**

Das Maximum der Besetzungsinversion $n_{\mathrm{p}0}$ werde zur Zeit $t = 0$ erreicht. Zu dieser Zeit werde auch die Schaltung der KERR-Zelle wirksam. Der Prozeß verläuft derart kurzzeitig, daß die Pumpleistung vernachlässigt werden kann. Aus den Bilanzgleichungen folgt daher

$$\frac{\mathrm{d}n_\mathrm{p}}{\mathrm{d}t} = -2n_\mathrm{p}B_fN, \tag{1}$$

$$\frac{\mathrm{d}N}{\mathrm{d}t} = \left(n_\mathrm{p}B_f - \frac{1}{T}\right)N. \tag{2}$$

Nach (2) ergibt sich für das Anfangsstadium des Impulses, wenn $n_{\mathrm{p}0} = n_\mathrm{p}(0)$ noch nicht merklich abgebaut ist,

$$N = N_0\,\mathrm{e}^{\left(n_{\mathrm{p}0}B_f - \frac{1}{T}\right)t}. \tag{2a}$$

Die Photonenkonzentration steigt im Anfangsstadium exponentiell an.

Um $n_p = n_p(t)$ zu berücksichtigen, lösen wir (1) nach d$t$ auf und setzen dieses Differential in (2) ein:

$$\frac{dN}{dn_p} = -\frac{1}{2} + \frac{1}{2B_f n_p T}. \tag{3}$$

Durch Integration erhält man

$$N - N_0 = -\frac{1}{2}(n_p - n_{p0}) + \frac{1}{2B_f T} \ln \frac{n_p}{n_{p0}}. \tag{4}$$

Bei steiler Veränderung von $N$ im Anfangs- und im Endstadium kann man $N_0 = N(0)$ und $N_\infty = N(\infty)$ gegen die Werte $N$ während der Aussendung des Riesenimpulses vernachlässigen und erhält damit aus (4)

$$\frac{n_{p\infty}}{n_{p0}} = 1 + \frac{1}{B_f n_{p0}} \ln \frac{n_{p\infty}}{n_{p0}}. \tag{5}$$

Setzen wir hierin den Schwellenwert nach (8.2.2./4)

$$n_{pS} = \frac{1}{TB_f} \tag{6}$$

ein, so ergibt sich nach Umformung

$$1 - \frac{n_{p\infty}}{n_{p0}} = \frac{n_{pS}}{n_{p0}} \ln \frac{n_{p0}}{n_{p\infty}} = 2{,}30 \frac{n_{pS}}{n_{p0}} \lg \frac{n_{p0}}{n_{p\infty}}. \tag{7}$$

Diese Größe gibt an, welcher Anteil der Überbesetzung nach Ausstrahlung des Riesenimpulses noch vorhanden ist.
Damit der Laser anschwingen kann, muß nach (8.2.2./4) die **Schwellenüberhöhung** $\frac{n_{p0}}{n_{pS}}$ größer als eins sein:

$$\frac{n_{p0}}{n_{pS}} > 1. \tag{8}$$

Nach (2) erhält man das Maximum $N_M$ der Photonenkonzentration für $\frac{dN}{dt} = 0$ bzw. zur Zeit $t = t_M$ mit

$$n_p(t_M) = n_{pS}. \tag{9}$$

Setzt man diesen Wert in (4) ein, ergibt sich bei Vernachlässigung von $N_0$

$$N_M = \frac{n_{p0}}{2} - \frac{n_{pS}}{2}\left(1 + \ln \frac{n_{p0}}{n_{pS}}\right) = \frac{n_{p0}}{2} - \frac{n_{pS}}{2}\left(1 + 2{,}30 \lg \frac{n_{p0}}{n_{pS}}\right). \tag{10}$$

Gemäß (1) und (2) können wir schreiben

$$\frac{d}{dt}(n_p + 2N) = -\frac{2N}{T}. \tag{11}$$

Durch Integration folgt bei Vernachlässigung des Anfangs- und des Endwertes von $N$

$$n_{p0} - n_{p\infty} = \frac{2}{T} \int_0^\infty N(t)\, dt. \tag{12}$$

Wird der zeitliche Verlauf von $N = N(t)$ durch eine GAUSS-Verteilung

$$N = N_M \, e^{-2\frac{(t-t_M)^2}{\Delta t^2}} \tag{13}$$

angenähert, wobei $\Delta t$ die Halbwertbreite des Impulses kennzeichnet, so erhält man nach (12) (vgl. [3] 1.2.)

$$n_{p0} - n_{p\infty} = \frac{2N_M}{T} \int_0^\infty e^{-\frac{2(t-t_M)^2}{\Delta t^2}} dt = \frac{\sqrt{\pi}}{T} N_M \Delta t, \tag{14}$$

d. h. für die Halbwertbreite

$$\Delta t = \frac{n_{p0} - n_{p\infty}}{\sqrt{\pi}\, N_M} T = 2T \frac{n_{p0} - n_{p\infty}}{\sqrt{\pi}\left[n_{p0} - n_{pS}\left(1 + \ln \frac{n_{p0}}{n_{pS}}\right)\right]}. \tag{15}$$

Nach den vorgegebenen Daten ist

$$n_{pS} = \frac{1}{TB_f} = \frac{1}{5 \cdot 10^{-8} \cdot 4 \cdot 10^{-17}} \text{m}^{-3} = 5 \cdot 10^{23}\ \text{m}^{-3}, \qquad \frac{n_{p0}}{n_{pS}} = \frac{2 \cdot 10^{24}}{5 \cdot 10^{23}} = 4.$$

Für die transzendente Gleichung nach (7)

$$1 - x = \frac{2{,}30}{4} \lg \frac{1}{x}$$

erhält man numerisch die Lösung

$$x = \frac{n_{p\infty}}{n_{p0}} = 0{,}0197,$$

d. h., mehr als 98% der Besetzungsinversion werden durch den Riesenimpuls abgebaut. Das Maximum der Photonendichte beträgt nach (10)

$$N_M = [10^{24} - 0{,}25 \cdot 10^{24}(1 + 2{,}30 \cdot 0{,}602)]\ \text{m}^{-3} = 4{,}04 \cdot 10^{23}\ \text{m}^{-3}.$$

Als Halbwertbreite ergibt sich nach (15)

$$\Delta t = \frac{0{,}983 \cdot 2 \cdot 10^{24}}{\sqrt{\pi} \cdot 4{,}04 \cdot 10^{23}} 5 \cdot 10^{-8}\ \text{s} = 137\ \text{ns}.$$

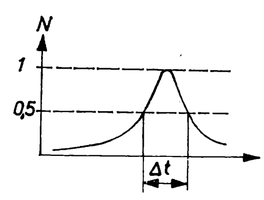



Bild 8.2.6. Impuls des gesteuerten Lasers

Der Verlauf des Laserimpulses ist in Bild 8.2.6. dargestellt. Nach der Theorie der GAUSS-Funktion (vgl. [3] 1.2.) werden zwischen den beiden Halbwerten 76% der Energie des Riesenimpulses ausgestrahlt. Für die mittlere Strahlungsleistung während dieser Zeit $\Delta t$ folgt daher

$$L = \frac{0{,}76(n_{p0} - n_{p\infty})\, hf}{\Delta t} V$$

$$= \frac{0{,}76 \cdot 0{,}983 \cdot 2 \cdot 10^{24} \cdot 6{,}626 \cdot 10^{-34} \cdot 4{,}32 \cdot 10^{14} \cdot 10^{-5}}{137 \cdot 10^{-9}}\ \text{W} = 29\ \text{MW}.$$



## Aufgaben

A 8.2.1. Wie groß sind der Frequenz- und der Wellenlängenabstand zweier benachbarter Eigenschwingungen $\Delta n_z = 1$ in einem offenen Resonator mit parallelen Spiegeln im Abstand $L = 20$ cm, wenn die Wellenlänge 600 nm beträgt?

A 8.2.2. Berechnen Sie für einen offenen Resonator mit parallelen, im Abstand $L = 40$ cm angeordneten, quadratischen Spiegeln der Kantenlänge $a = 1$ cm die Breite des Resonanzbereiches $\Delta\lambda$, wenn die Wellenlänge 800 nm, die Durchlässigkeit des einen Spiegels 0,01, die des anderen null beträgt.

A 8.2.3. Die Spiegelflächen eines Resonators seien nicht genau parallel, sondern um einen kleinen Ablenkwinkel $\beta$ gegeneinander geneigt. Stellen Sie eine Näherungsformel für den relativen Energieverlust $\delta_W$ bei einer Reflexion auf. Die Spiegel seien Kreisflächen mit dem Radius $a$.

A 8.2.4. Welcher relative Energieverlust tritt in einem Resonator infolge fehlerhafter Justierung bei jeder Reflexion auf, wenn die Abweichung von der Parallelen eine halbe Bogensekunde beträgt? Die Wellenlänge sei 600 nm, die Seitenlänge der quadratischen Spiegel $a = 0{,}5$ cm.

A 8.2.5. Im aktiven Medium eines Festkörperlasers mit dem Volumen $V = 20\ \text{cm}^3$ werde die mittlere spektrale Energiedichte $\varrho_f = 0{,}001\ \text{J s m}^{-3}$ erzeugt. Die relative Halbwertbreite der ausgestrahlten Linie beträgt $10^{-6}$, die Wellenlänge 1,06 µm. Welche Güte des Resonators ist erforderlich, wenn bei 0,2% Nutzung der im aktiven Medium erzeugten Energie eine Ausgangsleistung von 1 kW erreicht werden soll?

A 8.2.6. Wie groß ist die Anzahl der Photonen in einem Gaslaser, wenn die Ausgangsleistung 250 W beträgt und 20% der gespeicherten Energie genutzt werden? Die mittlere Aufenthaltsdauer der Photonen im Resonator sei $T = 1$ µs, die Wellenlänge der Strahlung 10,6 µm.

A 8.2.7. Für den stationären Betrieb eines Lasers werde ein Resonator mit dem Gütefaktor $Q = 10^8$ verwendet. Die Wellenlänge des ausgestrahlten Laserlichtes sei 649 nm. Der EINSTEIN-Koeffizient für die induzierte Emission habe den Wert $B_f = 3 \cdot 10^{-16}\ \text{m}^3\ \text{s}^{-1}$. Wie groß muß die erzeugte Besetzungsinversion sein?

A 8.2.8. Im Helium-Neon-Laser werde für den Wirkungsquerschnitt bei der induzierten Emission einer Laserlinie $\sigma = 2{,}5 \cdot 10^{-20}\ \text{m}^2$ gemessen. Welche Besetzungsinversion ist für die Anregung der Laserschwingung erforderlich, wenn ein Resonator der mittleren Aufenthaltsdauer $T = 10^{-7}$ s verwendet wird?

A 8.2.9. Bei der Strahlung eines Rubinlasers mögen 24% der eingestrahlten Energie auf den Kristall treffen. Davon werde ein Anteil von 8,5% durch die aktiven Zentren absorbiert. Die Wellenlänge der Pumpstrahlung liege bei 550 nm, die der Laserstrahlung bei 693 nm. Berechnen Sie den Wirkungsgrad des Lasers und die erforderliche Energie der Pumplichtquelle, wenn eine Ausgangsleistung von 20 W erzielt werden soll.

A 8.2.10. Ein Rubinlaser mit einer Dotierung von 0,035% Chromatomen soll eine Ausgangsleistung von 25 W im Dauerbetrieb aufweisen. Der Wirkungsgrad betrage 1,8%. Wie groß muß das Volumen des aktiven Mediums sein? Welche Pumpleistung ist für den Dauerbetrieb erforderlich?

A 8.2.11. Die Strahlung unter der Wellenlänge 633 nm hat beim Helium-Neon-Laser die relative Linienbreite $10^{-7}$. Der Gütefaktor des Resonators sei $Q = 10^9$, die mittlere Verweilzeit bei der spontanen Emission $\tau = 100$ ns. Berechnen Sie die erforderliche Überbesetzung für den Dauerbetrieb.

A 8.2.12. In einem Gaslaser mit dem EINSTEIN-Koeffizienten $B_f = 1{,}5 \cdot 10^{-14}\ \text{m}^3\ \text{s}^{-1}$ betrage die Besetzungsinversion im Dauerbetrieb $n_p = 5 \cdot 10^{19}\ \text{m}^{-3}$. Welche Generationsquote $R$ ist allein erforderlich, um die induzierte Emission im oberen Laserband auszugleichen? Die Photonenkonzentration betrage $N = 2 \cdot 10^{16}\ \text{m}^{-3}$.

A 8.2.13. Für einen Festkörperlaser sei $T = 0{,}05$ ms, $B_f = 4 \cdot 10^{-16}$ m³ s⁻¹, die Häufigkeit für Übergänge aus dem oberen Laserniveau $\gamma_2 = 10^5$ s$^{-1}$, die Häufigkeit spontaner Emissionsprozesse gegen die von Relaxationsprozessen zu vernachlässigen. Berechnen Sie die für den Laserbetrieb erforderliche Generationsquote $R_2$. Wie groß muß die Pumprate bei 10 cm$^3$ aktivem Medium sein?

A 8.2.14. Zur Gewährleistung der Stabilität wird für einen Festkörperlaser eine Abklingzeit von höchstens einer Millisekunde gefordert. Die Ausgangsleistung betrage 10 W, das aktive Medium habe das Volumen 20 cm$^3$, der Anteil der ausgestrahlten Laserenergie an der gespeicherten Energie im Resonator sei 10%. Welche Begrenzung ergibt sich daraus für den Laser, wenn die Ausgangsfrequenz $4{,}5 \cdot 10^{14}$ Hz beträgt?

A 8.2.15. Berechnen Sie den Anteil der bei einem gesteuerten Laserimpuls abgebauten Übersetzung, wenn die Schwellenüberhöhung den Wert 1,15 hat. Wie groß sind die mittlere Photonendichte und die Halbwertbreite, wenn die Überbesetzung bei Beginn des Laserimpulses $10^{24}$ m$^{-3}$ beträgt und die mittlere Aufenthaltsdauer im Resonator 10 ns erreicht?

## 8.3. Grundlagen der Holografie

### E Einführung

*Holografie und Fotografie*

Die Holografie ist ein Abbildungs- und Wiedergabeverfahren, bei dem die von einem Gegenstand ausgehenden Wellen gespeichert und danach rekonstruiert werden. Sie unterscheidet sich von der Fotografie sowohl durch die Aufnahme- und Wiedergabetechnik als auch durch das Speicherprinzip.

Bei der **fotografischen Abbildung** wird die Lichtintensität (im Idealfall) punktweise vom Gegenstand auf die Fotoplatte übertragen (vgl. Bild 8.3.1). Phasenverschiebungen zwischen den einzelnen Punkten gehen dabei verloren. Infolgedessen ist die Fotografie im großen Umfang mit dem Verlust räumlicher Anschaulichkeit verbunden.

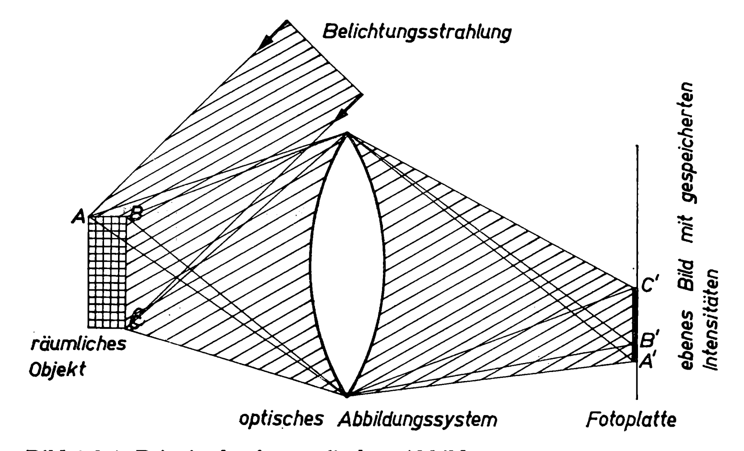
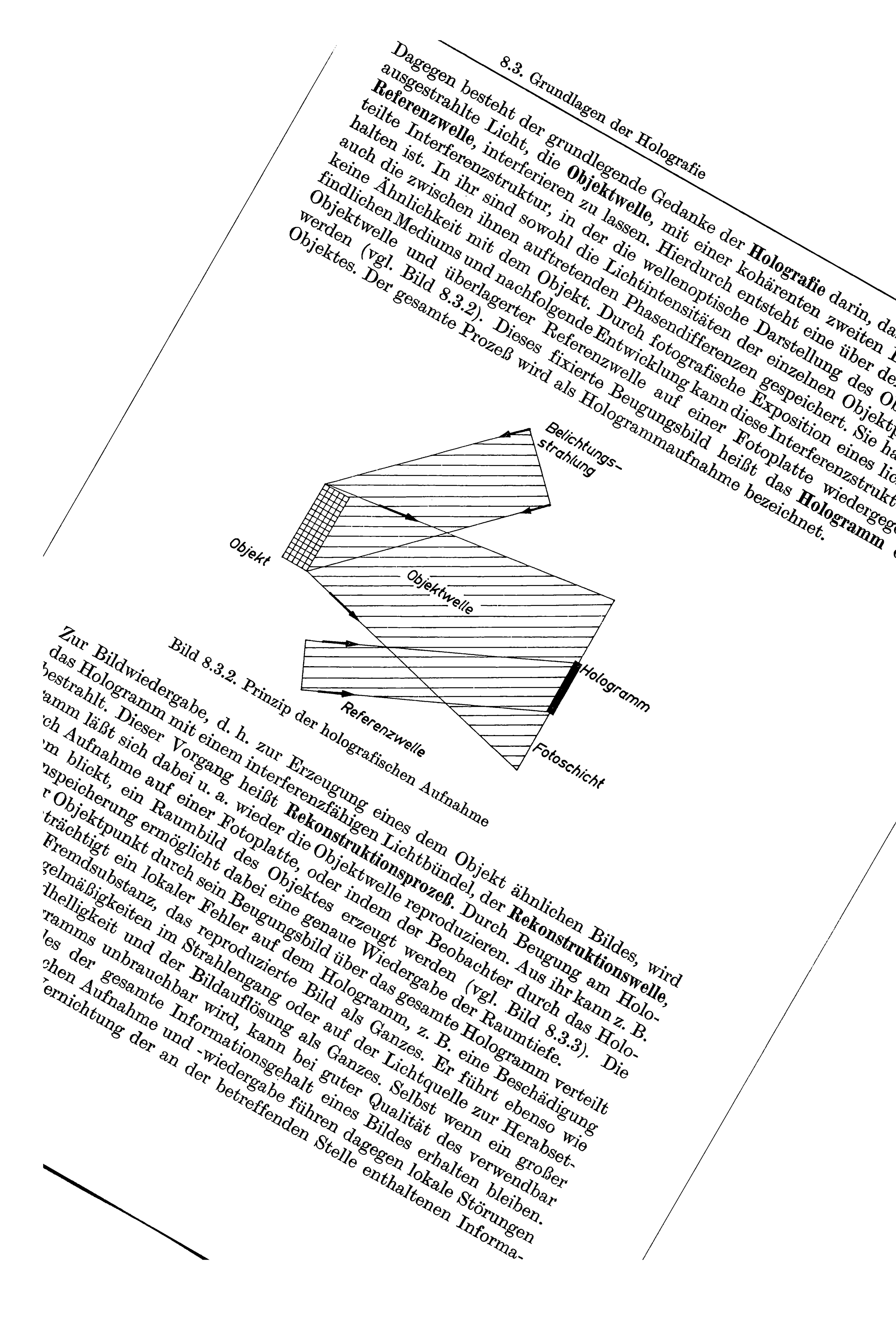



Bild 8.3.1. Prinzip der fotografischen Abbildung



Dagegen besteht der grundlegende Gedanke der **Holografie** darin, da
ausgestrahlte Licht, die **Objektwelle**, mit einer kohärenten zweiten
**Referenzwelle**, interferieren zu lassen. Hierdurch entsteht eine über de
teilte Interferenzstruktur, in der die wellenoptische **Darstellung** des Ob
halten ist. In ihr sind sowohl die Lichtintensitäten der einzelnen Objektp
auch die zwischen ihnen auftretenden Phasendifferenzen gespeichert. Sie ha
keine Ähnlichkeit mit dem Objekt. Durch fotografische Exposition eines lic
findlichen Mediums und nachfolgende Entwicklung kann diese Interferenzstrukt
Objektwelle und überlagerter Referenzwelle auf einer Fotoplatte wiedergege
werden (vgl. Bild 8.3.2). Dieses fixierte Beugungsbild heißt das **Hologramm**
Objektes. Der gesamte Prozeß wird als Hologrammaufnahme bezeichnet.



Bild 8.3.2. Prinzip der holografischen Aufnahme

Zur Bildwiedergabe, d. h. zur Erzeugung eines dem Objekt ähnlichen Bildes, wird
das Hologramm mit einem interferenzfähigen Lichtbündel, der **Rekonstruktionswelle**,
estrahlt. Dieser Vorgang heißt **Rekonstruktionsprozeß**. Durch Beugung am Holo-
amm läßt sich dabei u. a. wieder die Objektwelle reproduzieren. Aus ihr kann z. B.
ch Aufnahme auf einer Fotoplatte, oder indem der Beobachter durch das Holo-
m blickt, ein Raumbild des Objektes erzeugt werden (vgl. Bild 8.3.3). Die
nspeicherung ermöglicht dabei eine genaue Wiedergabe der Raumtiefe.
r Objektpunkt durch sein Beugungsbild über das gesamte Hologramm verteilt
trächtigt ein lokaler Fehler auf dem Hologramm, z. B. eine Beschädigung
Fremdsubstanz, das reproduzierte Bild als Ganzes. Er führt ebenso wie
gelmäßigkeiten im Strahlengang oder auf der Lichtquelle zur Herabset-
dhelligkeit und der Bildauflösung als Ganzes. Selbst wenn ein großer
ramms unbrauchbar wird, kann bei guter Qualität des verwendbar
es der gesamte Informationsgehalt eines Bildes erhalten bleiben.
chen Aufnahme und -wiedergabe führen dagegen lokale Störungen
ernichtung der an der betreffenden Stelle enthaltenen Informa-

Für die Realisierung holografischer Aufnahme- und Wiedergabeanordnungen sind optische Abbildungselemente wie Linsen, Prismen oder Spiegel nicht unbedingt erforderlich. Sämtliche Effekte werden durch Interferenz und Beugung des Lichtes erzielt. Die Holografie ist daher auch mit Wellen durchführbar, für die optische Abbildungselemente nicht vorhanden sind.

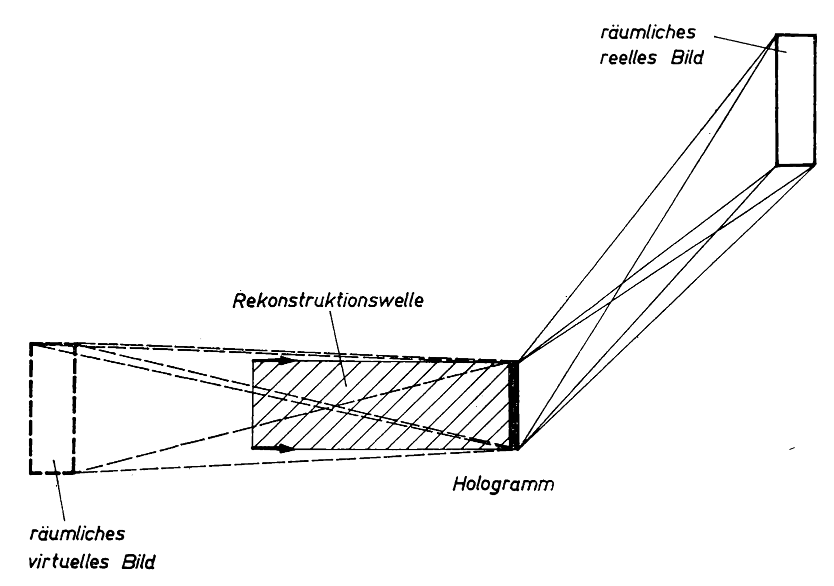



Bild 8.3.3. Prinzip der holografischen Wiedergabe

*Hologrammaufnahme und Bildwiedergabe*

Es bezeichne $A_S\,e^{-i(\omega t-\varphi_S)}$ eine vom Objektpunkt ausgehende **Signalwelle**, $A_R\,e^{-i(\omega t-\varphi_R)}$ die **Referenzwelle**. Da grundsätzlich alle Ausdrücke mit dem Faktor $e^{-i\omega t}$ versehen sind, kann dieser im folgenden unterdrückt werden. Die vom Objektpunkt ausgehende Signalwelle und die Referenzwelle werden daher durch ihre Amplituden

$$\boldsymbol{A}_S = A_S\,e^{i\varphi_S}, \tag{1}$$

$$\boldsymbol{A}_R = A_R\,e^{i\varphi_R} \tag{2}$$

wiedergegeben. Sowohl die Beträge $A_S$, $A_R$ als auch die Phasen sind im allgemeinen ortsabhängig. (1) und (2) stellen daher beliebige Wellenformen dar.
Bei **quadratischer Registrierung** der Signalwelle ist die erkennbare Wirkung der Intensität

$$\boldsymbol{A}_S\boldsymbol{A}_S^* = A_S^2 \tag{3}$$

proportional. Dabei geht die Phaseninformation $\varphi_S$ verloren. Wird dagegen die Signalwelle auf die Referenzwelle überlagert, so erhält man

$$\boldsymbol{A} = \boldsymbol{A}_S + \boldsymbol{A}_R = A_S\,e^{i\varphi_S} + A_R\,e^{i\varphi_R} \tag{4}$$

und daraus die Intensitätsverteilung

$$\boldsymbol{A}\boldsymbol{A}^* = \boldsymbol{A}_\mathrm{S}\boldsymbol{A}_\mathrm{S}^* + \boldsymbol{A}_\mathrm{R}\boldsymbol{A}_\mathrm{R}^* + \boldsymbol{A}_\mathrm{S}\boldsymbol{A}_\mathrm{R}^* + \boldsymbol{A}_\mathrm{S}^*\boldsymbol{A}_\mathrm{R} \tag{5a}$$

bzw.

$$\boldsymbol{A}\boldsymbol{A}^* = A_\mathrm{S}^2 + A_\mathrm{R}^2 + 2A_\mathrm{S}A_\mathrm{R}\cos(\varphi_\mathrm{S} - \varphi_\mathrm{R}). \tag{5b}$$

Es ergibt sich ein Interferenzausdruck, in dem sowohl die Amplituden als auch die Phasen enthalten sind. Wegen

$$\cos(\varphi_\mathrm{S} - \varphi_\mathrm{R}) = \cos(\varphi_\mathrm{R} - \varphi_\mathrm{S})$$

läßt sich jedoch nicht zwischen Phasenverzögerung und Phasenvorauseilung unterscheiden. Auf Grund dessen liefert jedes Hologramm im allgemeinen zwei Bilder des Objektes, die sich gegenseitig nicht stören dürfen.
Bei der Hologrammaufnahme wird, wie bei der fotografischen Speicherung, davon ausgegangen, daß die Amplitudentransmission des Speichermediums der Intensitätsverteilung proportional ist:

$$T_\mathrm{A} \sim \boldsymbol{A}\boldsymbol{A}^*. \tag{6}$$

Zur Rekonstruktion werde die fotografische Aufzeichnung mit kohärentem Licht durchstrahlt. Wenn die eingestrahlte Rekonstruktionswelle $\boldsymbol{A}_\mathrm{C}$ mit der Referenzwelle $\boldsymbol{A}_\mathrm{R}$ identisch ist, folgt nach (5a) und (2) als Amplitude des erzeugten Wellenfeldes

$$\boldsymbol{A}_\mathrm{C}T_\mathrm{A} = \boldsymbol{A}_\mathrm{R}T_\mathrm{A} \sim \boldsymbol{A}_\mathrm{R}(\boldsymbol{A}_\mathrm{S}\boldsymbol{A}_\mathrm{S}^* + \boldsymbol{A}_\mathrm{R}\boldsymbol{A}_\mathrm{R}^*) + \boldsymbol{A}_\mathrm{S}A_\mathrm{R}^2 + \boldsymbol{A}_\mathrm{S}^*A_\mathrm{R}^2. \tag{7}$$

Der dritte Summand $\boldsymbol{A}_\mathrm{S}A_\mathrm{R}^2$ stellt bis auf den Faktor $A_\mathrm{R}^2$ die Ausgangswelle $\boldsymbol{A}_\mathrm{S}$ dar, der vierte bis auf $A_\mathrm{R}^2$ die konjugierte Signalwelle. Die ersten beiden Summanden sind Störglieder. Abgesehen von Störfeldern, wird also durch Einstrahlung der Referenzwelle auf das Hologramm die Signalwelle zusammen mit ihrer konjugierten Welle wieder erzeugt.
Strahlt man dagegen als Rekonstruktionswelle $\boldsymbol{A}_\mathrm{C}$ die Signalwelle $\boldsymbol{A}_\mathrm{S}$ ein, so erhält man aus (6)

$$\boldsymbol{A}_\mathrm{C}T_\mathrm{A} = \boldsymbol{A}_\mathrm{S}T_\mathrm{A} \sim \boldsymbol{A}_\mathrm{S}(A_\mathrm{S}^2 + A_\mathrm{R}^2) + A_\mathrm{S}^2\boldsymbol{A}_\mathrm{R}^* + A_\mathrm{S}^2\boldsymbol{A}_\mathrm{R}, \tag{8}$$

d. h. im dritten und vierten Summanden bis auf multiplikative Größen die Referenz- und die konjugierte Referenzwelle. Diese Eigenschaft wird als **Reziprozität** von Signal- und Referenzwelle bezeichnet.

*Technik holografischer Wiedergabeverfahren*

Ansätze für holografische Abbildungsverfahren finden sich bereits in Arbeiten von E. Abbe aus dem Jahre 1910. Durch D. Gabor wurden in den Jahren 1948 bis 1950 die theoretischen Grundlagen der Holografie abgeleitet. Erst mit der **Erfindung des Lasers** im Jahre 1961 stand jedoch eine Lichtquelle zur Erzeugung eines hinreichend intensiven kohärenten Lichtfeldes von großem Querschnitt zur Verfügung, mit dem Hologramme ausreichender Qualität und kurzer Belichtungszeit gewonnen werden konnten.

Hologramme können als **Amplitudenhologramme** erzeugt werden, indem die einfallende Strahlung aus Referenz- und Signalwelle zu einer lokalen Änderung des Absorptionskoeffizienten benutzt wird, z.B. zur Schwärzung der Fotoplatte. Dadurch wird in erster Linie die Amplitude der rekonstruierenden Strahlung beeinflußt. Wird das Hologramm dagegen durch Änderung der Brechzahl $n$ erzeugt, so wirkt sich das bei der rekonstruierenden Strahlung maßgeblich in einer Änderung der Phase aus. Derartige Hologramme heißen daher **Phasenhologramme**. Sie können durch Bleichverfahren erzeugt werden, z. B. bei Verwendung von Silberhalogenidschichten, indem nach der fotografischen Behandlung das abgeschiedene Silber in einem Bleichbad entfernt wird. Im Endeffekt führen Phasen- ebenso wie Amplitudenhologramme zu Intensitätsänderungen in der rekonstruierten Strahlung. Dabei können Phasenhologramme Bilder liefern, die die Qualität der aus Amplitudenhologrammen gewonnenen übertrifft.
Die für holografische Aufnahmen entwickelten **Fotoplatten** aus Silberhalogenidschichten besitzen Auflösungsvermögen zwischen 1500 und 3000 Linien $mm^{-1}$. Für die erforderliche Bestrahlung werden Werte zwischen $10^{-4}$ und $10^{-1}$ mJ $cm^{-2}$ angegeben. Der Beugungswirkungsgrad, das Verhältnis zwischen der Intensität einer in erster Ordnung rekonstruierten Signalwelle zur Intensität der Rekonstruktionswelle, schwankt für die entwickelten Silberhalogenidschichten zwischen 0,5 % und 3 % (vgl. [37]).



## Probleme

### 8.3.1. Abbildung eines Achsenpunktes durch Geradeausholografie

Unter Geradeausholografie (in-line-Verfahren) versteht man holografische Abbildungsverfahren, bei denen die Wellenfronten der Signalwelle symmetrisch zur Ausbreitungsrichtung der Referenzwelle liegen (vgl. Bild 8.3.4).

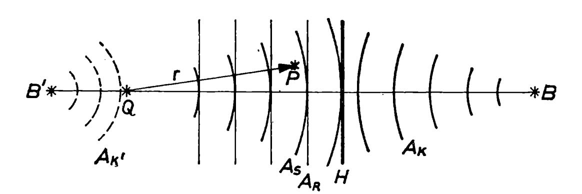



Bild 8.3.4. Abbildung durch Geradeausholografie mit ebener Referenz- und ebener Rekonstruktionswelle.
$A_S$ Wellenfront der Signalwelle, $A_R$ Wellenfront der Referenz- und der Rekonstruktionswelle, $A_K$, $A_K'$ Wellenfronten der einlaufenden und der virtuell einlaufenden Kugelwelle des reellen und des virtuellen Bildpunktes, H Hologramm

Es werde ein punktförmiges Objekt $Q$ durch Geradeausholografie abgebildet. Wir wählen die Hologrammebene als $x, y$-Ebene. Negative $z$-Werte bezeichnen Punkte links, positive rechts der Hologrammebene. Die $z$-Achse gehe durch den Objektpunkt und definiere die optische Achse.

Das punktförmige Objekt habe die $z$-Koordinate $z_0 = -5$ cm. Die punktförmige Lichtquelle $L$ auf der Achse bei $z_L = -15$ cm beleuchte das Objekt und liefere gleichzeitig die Referenzwelle (vgl. Bild 8.3.5). Zur Rekonstruktion werde das Hologramm mit einer punktförmigen Lichtquelle $C$ bestrahlt, die sich auf der Achse bei $z_C = -20$ cm befindet. Bestimmen Sie die Lage des reellen und des virtuellen Bildpunktes.

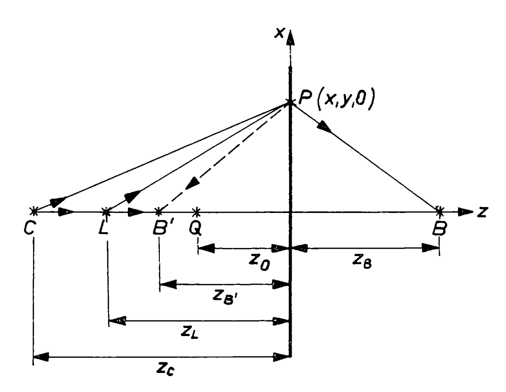



Bild 8.3.5. Lage charakteristischer Punkte bei der Geradeausholografie.
$Q$ Objektpunkt, $B$ reeller Bildpunkt, $B'$ virtueller Bildpunkt,
$L$, $C$ Lichtquellen der Referenz- und der Rekonstruktionswelle

**Lösung:**

Wir betrachten einen Hologrammpunkt $P$ im Abstand $x$ von der optischen Achse. Die Wellen, die ihn, von $L$ ausgehend, durch Beugung an $Q$ erreichen, haben gegen die direkt von $L$ nach $P$ gerichteten Wellen den Gangunterschied

$$\delta = \overline{LQ} + \overline{QP} - \overline{LP} = z_L - z_0 + \sqrt{z_0^2 + x^2} - \sqrt{z_C^2 + x^2}. \qquad (1)$$

Wir können $x \ll z_0$, $x \ll z_L$ voraussetzen und erhalten damit durch Entwicklung der Wurzeln

$$\delta = z_L - z_0 + z_0 + \frac{x^2}{2z_0} - \left(z_L + \frac{x^2}{2z_L}\right) = \frac{x^2}{2}\left(\frac{1}{z_0} - \frac{1}{z_L}\right). \qquad (2)$$

Die Bildpunkte $B$ und $B'$ sind dadurch bestimmt, daß, bezogen auf diese, bei Bestrahlung des Hologramms durch das Rekonstruktionslicht der Phasenunterschied $\delta$ wieder hervorgerufen wird. Es gilt z. B. für $B'$

$$\delta = \overline{CB'} + \overline{B'P} - \overline{CP}. \qquad (3)$$

Die $z$-Koordinate des virtuellen Bildpunktes $B'$ sei $z_{B'}$. Es folgt für achsennahe Punkte aus (3)

$$\delta = \frac{x^2}{2}\left(\frac{1}{z_{B'}} - \frac{1}{z_C}\right). \qquad (4)$$

Durch Gleichsetzen erhält man aus (2) und (4)

$$\frac{1}{z_{B'}} = \frac{1}{z_C} + \frac{1}{z_0} - \frac{1}{z_L}. \qquad (5)$$

Für die Konstruktion des reellen Bildpunktes $B$ geht man davon aus, daß die von $C$ nach $P$

gerichtete Rekonstruktionswelle die in $B$ konvergierende Welle mit der Phasendifferenz $-\delta$ hervorruft:

$$-\delta = \overline{CB} + \overline{BP} - \overline{CP}. \tag{6}$$

Der reelle und der imaginäre Bildpunkt ergeben sich nach (8.3./5b) daraus, daß positive und negative Phasendifferenzen in der Holografie nicht zu unterscheiden sind.
Bezeichnet $z_B$ die $z$-Koordinate von $B$, so erhält man aus (6)

$$-\delta = \frac{x^2}{2}\left(\frac{1}{z_B} - \frac{1}{z_C}\right). \tag{7}$$

Aus dem Vergleich mit (2) folgt nach Vorzeichenumkehr

$$\frac{1}{z_B} = \frac{1}{z_C} - \frac{1}{z_0} + \frac{1}{z_L}. \tag{8}$$

Mit den vorgegebenen Werten erhalten wir

$$\frac{1}{z_{B'}} = \left(\frac{1}{-20} + \frac{1}{-5} - \frac{1}{-15}\right)\text{cm}^{-1}, \qquad z_{B'} = -\frac{60}{11}\,\text{cm} = -5{,}45\ \text{cm};$$

$$\frac{1}{z_B} = \left(\frac{1}{-20} - \frac{1}{-5} + \frac{1}{-15}\right)\text{cm}^{-1}, \qquad z_B = \frac{60}{5}\,\text{cm} = 12\ \text{cm}.$$

Reelles und virtuelles Bild entstehen auf der optischen Achse und stören sich dadurch gegenseitig. Um diese Störung zu beseitigen, wurde die Trägerfrequenzholografie entwickelt, die mit schrägeinfallender Referenzwelle arbeitet (vgl. Bild 8.3.6).

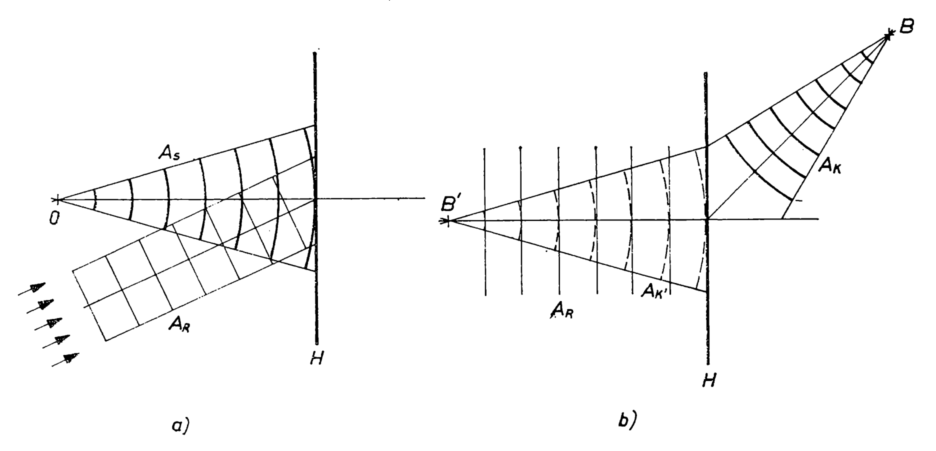



Bild 8.3.6. Holografie mit schrägeinfallender Referenzwelle (Referenz- und Rekonstruktionswelle kommen aus dem Unendlichen). a) Aufnahme, b) Wiedergabe

## 8.3.2. Holografie mit schrägeinfallender Referenzwelle

Der Objektpunkt habe die Koordinaten $x_0 = 4$ mm, $y_0 = 2$ mm, $z_0 = -3$ cm. Die Hologrammebene sei $x, y$-Ebene. Vom Punkt $R$ mit den Koordinaten $x_R = 3$ mm, $y_R = -1$ mm, $z_R = -5$ cm falle die Referenzwelle ($\lambda_0 = 400$ nm) ein.

Bei der Rekonstruktion werde Licht der Wellenlänge $\lambda_C = 800$ nm verwendet. Die Koordinaten der Rekonstruktionslichtquelle $C$ seien $x_C = -2$ mm, $y_C = 6$ mm, $z_C = -5$ cm (vgl. Bild 8.3.7). Der Abbildungsmaßstab bei der Rekonstruktion im Verhältnis zur Hologrammaufnahme sei gleich dem Verhältnis der verwendeten Wellenlängen:

$$m = \frac{\lambda_C}{\lambda_0} = 2.$$

Bestimmen Sie in erster Näherung die Koordinaten des reellen und des virtuellen Bildpunktes.

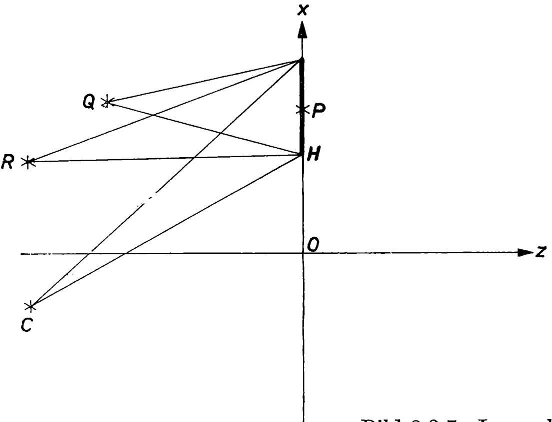



Bild 8.3.7. Lage charakteristischer Punkte bei der Trägerfrequenzholografie (vgl. 8.3.2.)

**Lösung:**

Es sei $P(x, y, 0)$ ein Punkt in der Hologrammebene. Wir berechnen für jede Welle die Phasendifferenz zwischen der im Punkt $P$ und der im Koordinatenanfangspunkt eintreffenden Erregung. Für die von $Q$ ausgehende Signalwelle folgt

$$\varphi_S = \frac{2\pi}{\lambda_0} (\overline{QP} - \overline{QO})$$

$$= \frac{2\pi}{\lambda_0} \left(\sqrt{(x - x_0)^2 + (y - y_0)^2 + z_0^2} - \sqrt{x_0^2 + y_0^2 + z_0^2}\right). \tag{1a}$$

Wir entwickeln die Wurzeln unter der Voraussetzung achsennaher Punkte $Q$, $R$ und $P$. Es folgt

$$\varphi_S = \frac{\pi}{\lambda_0 z_0} (x^2 + y^2 - 2xx_0 - 2yy_0). \tag{1}$$

Ebenso erhalten wir für die Phasendifferenz $\varphi_R$ zwischen der von $R$ nach $P$ und der von $R$ nach $O$ gehenden Erregung

$$\varphi_R = \frac{\pi}{\lambda_0 z_R} (x^2 + y^2 - 2xx_R - 2yy_R). \tag{2}$$

Die unterschiedlichen Wellenlängen $\lambda_0$ bei der Hologrammaufnahme und $\lambda_C$ bei der Rekonstruktion führen zu einer Maßstabänderung. Um diese berücksichtigen zu können, bezeichnen wir die Hologrammkoordinaten des Punktes $P$ bei der Rekonstruktion mit $x'$ und $y'$. Zwischen den Koordinaten besteht die Beziehung

$$x' = mx, \qquad y' = my. \tag{3}$$

Für die Phasendifferenz $\varphi_C$ zwischen der von $C$ nach $P(x', y', 0)$ und der von $C$ nach $O$ gehenden Erregung folgt analog (1) und (2)

$$\varphi_C = \frac{\pi}{\lambda_C z_C}(x'^2 + y'^2 - 2x'x_R - 2y'y_R). \tag{4}$$

Bezeichnen

$$\boldsymbol{A}_S = A_S\,e^{i\varphi_S}, \qquad \boldsymbol{A}_R = A_R\,e^{i\varphi_R}, \qquad \boldsymbol{A}_C = A_C\,e^{i\varphi_C} \tag{5}$$

Signal-, Referenz- und Rekonstruktionswelle, so ergibt sich für die Amplitudentransmission des fotografischen Mediums bei der Hologrammaufnahme

$$T_A \sim A_S^2 + A_R^2 + A_S A_R\,e^{i(\varphi_S-\varphi_R)} + A_S A_R\,e^{-i(\varphi_S-\varphi_R)}. \tag{6}$$

Für die Amplitudentransmission bei der Rekonstruktion erhält man

$$\begin{aligned}\boldsymbol{A}_C T_A \sim\ & A_S^2 A_C\,e^{i\varphi_C} + A_R^2 A_C\,e^{i\varphi_C} \quad \text{(Störanteil)}\\ & + A_C A_R\,e^{-i(\varphi_R-\varphi_C)}\,A_S\,e^{i\varphi_S}\\ & + A_C A_R\,e^{i(\varphi_R+\varphi_C)}\,A_S\,e^{-i\varphi_S}.\end{aligned} \tag{7}$$

Darin ist die zweite Zeile der Signalwelle, die dritte der konjugierten Signalwelle proportional. Die zweite Zeile führt daher auf den virtuellen, die dritte auf den reellen Bildpunkt. Zur Bestimmung der Koordinaten dieser Punkte berechnen wir die Phasen

$$\begin{aligned}\varphi_v = \varphi_S - \varphi_R + \varphi_C = \frac{\pi}{\lambda_0}\left(\frac{x^2 + y^2 - 2(xx_0 + yy_0)}{z_0} - \frac{x^2 + y^2 - 2(xx_R + yy_R)}{z_R}\right)\\ + \frac{\pi}{\lambda_C}\,\frac{x'^2 + y'^2 - 2(x'x_C + y'y_C)}{z_C}\end{aligned} \tag{8}$$

und

$$\begin{aligned}\varphi_r &= -\varphi_S + \varphi_R + \varphi_C\\ &= \frac{\pi}{\lambda_0}\left(-\frac{x^2 + y^2 - 2(xx_0 + yy_0)}{z_0} + \frac{x^2 + y^2 - 2(xx_R + yy_R)}{z_R}\right)\\ &\quad + \frac{\pi}{\lambda_C}\,\frac{x'^2 + y'^2 - 2(x'x_C + y'y_C)}{z_C}.\end{aligned} \tag{9}$$

Unter Berücksichtigung von (3) folgt aus (8) durch Umformen

$$\begin{aligned}\varphi_v = \frac{\pi}{\lambda_0}\Bigg\{&(x'^2 + y'^2)\left[\frac{1}{z_C} + \frac{\lambda_C}{m^2\lambda_0}\left(\frac{1}{z_0} - \frac{1}{z_R}\right)\right]\\ &- 2x'\left[\frac{x_C}{z_C} + \frac{\lambda_C}{m\lambda_0}\left(\frac{x_0}{z_0} - \frac{x_R}{z_R}\right)\right] - 2y'\left[\frac{y_C}{z_C} + \frac{\lambda_C}{m\lambda_0}\left(\frac{y_0}{z_0} - \frac{y_R}{z_R}\right)\right]\Bigg\},\end{aligned} \tag{10}$$

während sich aus (9)

$$\begin{aligned}\varphi_r = \frac{\pi}{\lambda_0}\Bigg\{&(x'^2 + y'^2)\left[\frac{1}{z_C} - \frac{\lambda_C}{m^2\lambda_0}\left(\frac{1}{z_0} - \frac{1}{z_R}\right)\right]\\ &- 2x'\left[\frac{x_C}{z_C} - \frac{\lambda_C}{m\lambda_0}\left(\frac{x_0}{z_0} - \frac{x_R}{z_R}\right)\right] - 2y'\left[\frac{y_C}{z_C} - \frac{\lambda_C}{m\lambda_0}\left(\frac{y_0}{z_0} - \frac{y_R}{z_R}\right)\right]\Bigg\}\end{aligned} \tag{11}$$

ergibt.

Aus dem Vergleich mit (4) erkennt man, daß jeder dieser beiden Ausdrücke als Phasenglied einer von $Q_v$ kommenden bzw. nach $Q_r$ gehenden Welle aufgefaßt werden kann. Hierzu hat man für die Koordinaten des virtuellen Bildpunktes $Q_v$ zu schreiben

$$x_v = \frac{\lambda_0 m^2 x_C z_0 z_R + \lambda_C m z_C (x_0 z_R - x_R z_0)}{\lambda_0 m^2 z_0 z_R + \lambda_C m z_C (z_R - z_0)}, \tag{12}$$

$$y_v = \frac{\lambda_0 m^2 y_C z_0 z_R + \lambda_C m z_C (y_0 z_R - y_R z_0)}{\lambda_0 m^2 z_0 z_R + \lambda_C m z_C (z_R - z_0)}, \tag{13}$$

$$z_v = \frac{\lambda_0 m^2 z_C z_0 z_R}{\lambda_0 m^2 z_0 z_R + \lambda_C m z_C (z_R - z_0)}. \tag{14}$$

Damit sind die Koordinaten des virtuellen Bildpunktes bestimmt. Für den reellen Bildpunkt erhält man die Koordinaten

$$x_r = \frac{\lambda_0 m^2 x_C z_0 z_R - \lambda_C m z_C (x_0 z_R - x_R z_0)}{\lambda_0 m^2 z_0 z_R - \lambda_C m z_C (z_R - z_0)}, \tag{15}$$

$$y_r = \frac{\lambda_0 m^2 y_C z_0 z_R - \lambda_C m z_C (y_0 z_R - y_R z_0)}{\lambda_0 m^2 z_0 z_R - \lambda_C m z_C (z_R - z_0)}, \tag{16}$$

$$z_r = \frac{\lambda_0 m^2 z_C z_0 z_R}{\lambda_0 m^2 z_0 z_R - \lambda_C m z_C (z_R - z_0)}. \tag{17}$$

Wenn man $\frac{\lambda_C}{\lambda_0} = m$ in (12) bis (17) einsetzt, kürzt sich der Faktor $m^2$ in sämtlichen Ausdrücken heraus.

Mit den vorgegebenen Werten folgt aus (12) bis (14) für die Koordinaten des virtuellen Bildpunktes

$$x_v = \frac{-0{,}2 \cdot 3 \cdot 5 - 5(-0{,}4 \cdot 5 + 0{,}3 \cdot 3)}{3 \cdot 5 - 5(-5 + 3)} \text{ cm} = 1 \text{ mm},$$

$$y_v = \frac{-0{,}6 \cdot 3 \cdot 5 - 5(-0{,}2 \cdot 5 + 0{,}1 \cdot 3)}{25} \text{ cm} = -2{,}2 \text{ mm},$$

$$z_v = \frac{-5 \cdot 3 \cdot 5}{25} \text{ cm} = -3 \text{ cm}.$$

Für die Koordinaten des reellen Bildpunktes ergibt sich aus (15) bis (17)

$$x_r = -1{,}7 \text{ cm}, \qquad y_r = -2{,}5 \text{ cm}, \qquad z_r = -15 \text{ cm}.$$

### 8.3.3. Laterale und longitudinale Vergrößerung achsennaher Punkte

Die laterale Vergrößerung eines Bildes ist gegeben durch

$$V_{\text{lat}} = \frac{dx}{dx_0} = \frac{dy}{dy_0}, \tag{1}$$

die longitudinale Vergrößerung durch

$$V_{\text{long}} = \frac{dz}{dz_0}. \tag{2}$$

Darin bedeuten $x$, $y$, $z$ die Koordinaten des reellen bzw. des virtuellen Bildpunktes, $x_0$, $y_0$, $z_0$ die Koordinaten des Objektpunktes. Bestimmen Sie die Bedingung dafür, daß bei der holografischen Abbildung ein Bild entsteht, bei dem keine räumlichen Verzerrungen auftreten und auch die Tiefenausdehnung den Verhältnissen des Objektes entspricht.
Berechnen Sie die Vergrößerung des reellen Bildes für achsennahe Punkte, wenn sich das Objekt 10 cm vor der Hologrammebene befindet und die Referenzwelle von einem Punkt 25 cm, die Rekonstruktionswelle von einem Punkt 40 cm von der Hologrammebene entfernt ausgeht. Die bei der Aufnahme verwendete Wellenlänge sei $\lambda_0 = 600$ nm, der Abbildungsmaßstab unabhängig von der Wellenlänge $m = 1{,}5$.

**Lösung:**

Aus den Formeln für die Koordinaten des reellen Bildpunktes nach (8.3.2./15) und (8.3.2./16) folgt mittels (1) als laterale Vergrößerung

$$V_{\text{lat r}} = \frac{m}{1 - \frac{\lambda_0}{\lambda_C} \frac{z_0}{z_C} m^2 - \frac{z_0}{z_R}}. \tag{3}$$

Die longitudinale Vergrößerung ist gemäß (2) und (8.3.2./16) durch

$$V_{\text{long r}} = -\frac{\lambda_0}{\lambda_C} \frac{m^2}{1 - \frac{\lambda_0}{\lambda_C} \frac{z_0}{z_r} m^2 - \frac{z_0}{z_R}} \tag{4}$$

gegeben. Aus dem Vergleich von (3) und (4) folgt

$$V_{\text{long r}} = -\frac{\lambda_0}{\lambda_C} V_{\text{lat r}}^2. \tag{5}$$

Wählt man hiernach

$$\lambda_C = \lambda_0 V_{\text{lat r}}, \tag{6}$$

so stimmen longitudinale und laterale Vergrößerung überein, und das erzeugte Bild entspricht dem Objekt.
Wir setzen die laterale Vergrößerung gemäß (3) in (6) ein und lösen nach $\frac{\lambda_C}{\lambda_0}$ auf. Es ergibt sich

$$\frac{\lambda_C}{\lambda_0} = m \frac{1 + \frac{z_0}{z_C} m}{1 - \frac{z_0}{z_R}}, \tag{7}$$

mit den vorgebenen Werten

$$\frac{\lambda_C}{\lambda_0} = 1{,}5 \cdot \frac{1 + \frac{10}{40} \cdot 1{,}5}{1 - \frac{10}{25}} = 3{,}44.$$

Damit folgt aus (3) für die gesuchte Vergrößerung $V = V_{\text{lat r}} = V_{\text{long r}}$

$$V = \frac{1{,}5}{1 - \frac{1{,}5^2}{3{,}44 \cdot 4} - \frac{1}{2{,}5}} = 3{,}44.$$

## A Aufgaben

A 8.3.1. Die von einem punktförmigen Objekt ausgehende Signalwelle $A_S = \frac{A_S}{r} e^{ikr}$ werde mit einer ebenen Referenzwelle $A_R = A_R\, e^{ikz}$ überlagert, deren Wellenfronten symmetrisch zur Signalwelle und parallel zur Hologrammebene $z = 0$ verlaufen. Bestimmen Sie die Intensitätsverteilung in der Hologrammebene und untersuchen Sie das entstehende Wellenfeld, wenn auf das erzeugte Hologramm als Rekonstruktionswelle wieder die Referenzwelle gerichtet wird. Die Amplitudentransmission $T_A$ sei der Intensitätsverteilung in der Hologrammebene proportional. Bestimmen Sie die den virtuellen und die den reellen Bildpunkt liefernde Welle.

A 8.3.2. Die vom Objektpunkt ausgehende Kugelwelle $\frac{A_S}{r} e^{ikr}$ werde mit einer ebenen Referenzwelle überlagert, die senkrecht auf die Hologrammebene fällt. Untersuchen Sie die Amplitudenverteilung des entstehenden Wellenfeldes, wenn als Rekonstruktionswelle wieder die Signalwelle auf das Hologramm gerichtet wird.

A 8.3.3. Bestimmen Sie zu Aufgabe A 8.3.2. das entstehende Wellenfeld, wenn als Rekonstruktionswelle die konjugierte Signalwelle $\frac{A}{r} e^{-ikr}$ auf das Hologramm gerichtet wird.

A 8.3.4. Der Objektpunkt habe vom Hologramm den Abstand $z_0$. Bestimmen Sie die Lage des reellen und des virtuellen Bildpunktes unter der Voraussetzung achsennaher Punkte, wenn sowohl das Licht der Referenz- als auch das der Rekonstruktionswelle parallel zur Achse gerichtet ist.

A 8.3.5. Vom Objektpunkt gehe eine Kugelwelle aus. Die ebene Referenzwelle falle unter dem Winkel $\vartheta$ gegen die Hologrammnormale ein. Untersuchen Sie das durch die Rekonstruktionswelle erzeugte Wellenfeld, wenn diese senkrecht auf das Hologramm trifft.

A 8.3.6. Wie hängen laterale und longitudinale Vergrößerung vom Verhältnis der Wellenlängen bei der Aufnahme und bei der Rekonstruktion ab, wenn diese mit parallelem Licht erfolgt?

A 8.3.7. Ein Achsenpunkt soll durch Geradeausholografie abgebildet werden, so daß der Abstand zwischen reellem und virtuellem Bildpunkt 2 m beträgt und die beiden Bilder symmetrisch zur Hologrammebene liegen. Der Objektpunkt befindet sich 4 m links von der Hologrammebene. Wo sind die Referenz- und die Rekonstruktionslichtquelle aufzustellen?

A 8.3.8. Bei der Abbildung durch Trägerfrequenzholografie habe der Objektpunkt die Koordinaten $x_0 = 5$ mm, $y_0 = 0$, $z_0 = -4$ cm. Die Aufnahme erfolge mit parallelem Licht der Wellenlänge 400 nm, das unter dem Winkel 10° gegen die Achse und senkrecht zur $y$-Achse einfällt. Bei der Rekonstruktion werde Licht der Wellenlänge 600 nm verwendet, das 3 m links von der Hologrammebene von der Achse ausgeht. Der Abbildungsmaßstab sei $m = 10$. Bestimmen Sie die Lage des reellen und des virtuellen Bildpunktes.

A 8.3.9. Wie ist in A 8.3.8. die Wellenlänge der Rekonstruktionswelle zu wählen, damit das erzeugte Bild räumlich dem Objekt entspricht?

# Lösung der Aufgaben

A 1.1.1. $\Phi_e = 23{,}4$ W

A 1.1.2. $L_e = 0{,}0318$ W m$^{-2}$

A 1.1.3. $E = 6{,}2$ lx

A 1.1.4. $\Phi_L = 21{,}5$ lm

A 1.1.5. $E = 0{,}38$ lx

A 1.1.6. $P = 141$ W

A 1.1.7. $P = 615$ W

A 1.2.1. $\varphi = 45°$, $e = 0{,}0718$

A 1.2.2. $\delta = -\frac{\pi}{2}$

A 1.2.3. $\sqrt{7} \sin\left(\omega t - \arctan\frac{\sqrt{3}}{2}\right)$

A 1.2.4. Linkselliptisch $x = a \cos \omega t$, $y = b \sin \omega t$;
rechtselliptisch $x = a \cos \omega t$, $y = -b \sin \omega t$

A 1.2.5. $\frac{\partial^2 \psi}{\partial r^2} + \frac{1}{r}\frac{\partial \psi}{\partial r} = \frac{1}{u^2}\frac{\partial^2 \psi}{\partial t^2}$ ergibt mit $x = \frac{\omega}{u} r$, $\psi = y(x)\,e^{i\omega t}$

$$\frac{d^2 y}{dx^2} + \frac{1}{x}\frac{dy}{dx} + y = 0$$

mit der BESSEL-Funktion und der NEUMANN-Funktion als linear unabhängige Lösungen.

A 1.2.6. $v \leqq c$; daraus für die Phasengeschwindigkeit $u \geqq c$.

A 1.2.7. $\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial y^2} - \frac{1}{u^2}\frac{\partial^2 \psi}{\partial t^2} = 0$ wird durch eine Reihe

$$\psi = \frac{1}{\sqrt{r}} f_1\left(\frac{r}{u} - t\right) + \frac{1}{\sqrt{r^3}} f_2\left(\frac{r}{u} - t\right) + \dots \text{ gelöst.}$$

Die einfache Lösung durch Kugelwellen ist nur im ein- und dreidimensionalen Medium möglich.

A 1.2.8. $v = \frac{c}{u}$ wird für $\frac{\mathrm{d}u}{\mathrm{d}\omega} = \left(\frac{1}{u^2} - \frac{1}{c}\right)$ erfüllt; $\frac{\mathrm{d}n}{\mathrm{d}\omega} = -\frac{n^2}{c}\frac{\mathrm{d}u}{\mathrm{d}\omega}$, $u = \frac{c}{n}$

A 1.2.9. $m\ddot{\boldsymbol{X}} + k\boldsymbol{X} = 0$, $\boldsymbol{X} = \boldsymbol{X}_1 \cos \omega_0 t + \boldsymbol{X}_2 \sin \omega_0 t$, $\omega_0 = \sqrt{\frac{k}{m_0}}$

A 1.2.10. $\boldsymbol{F} = \boldsymbol{F}_\mathrm{r} + \boldsymbol{F}_\mathrm{a}$, $m\ddot{\boldsymbol{X}} + k\boldsymbol{X} = \boldsymbol{c}\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega t}$; Lösung:

$\boldsymbol{X} = \boldsymbol{X}_{11} \sin \omega t + \boldsymbol{X}_{01} \cos \omega_0 t + \boldsymbol{X}_{02} \sin \omega_0 t$,

$$\boldsymbol{X}_{11} = \frac{\boldsymbol{c}}{m_0({\omega_0}^2 - \omega^2)}$$

A 1.2.11. $\frac{v - \frac{c}{n}}{\frac{c}{n}} = 7{,}5 \cdot 10^{-3}$

A 1.2.12. $v - \frac{c}{n} = -0{,}083\,\frac{c}{n}$

A 1.3.1. Druck = Impulsstromdichte. Da vollständige Reflexion stattfindet, verdoppelt sich der Impuls: $p_\mathrm{opt} = \frac{2S}{c}$; $p_\mathrm{opt} = 0{,}66 \cdot 10^{-8}$ Pa.

A 1.3.2. $\mathrm{d}F = \frac{\mathrm{d}S}{c}\,\mathrm{d}A$, $M = \frac{2Sb}{c}\int\limits_0^a x\,\mathrm{d}x = \frac{Sa^2b}{c}$, $M = 3 \cdot 10^{-16}$ N m

A 1.3.3. $p_\mathrm{opt} = \frac{2S}{c}\cos\alpha$; $p_\mathrm{opt} = 0{,}5 \cdot 10^{-10}$ Pa, $F = 10^{-10}$ N

A 1.3.4. $E_0 = 1{,}03 \cdot 10^3$ V m$^{-1}$, $H_0 = 2{,}72$ A m$^{-1}$

A 1.3.5. $k = \frac{2\pi}{2 \cdot 10^{-7}}\frac{1}{\sqrt{3}}(1, 1, -1)$; $E = E_0\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}\left[\omega t - \frac{10^7}{\sqrt{3}}\pi(x+y-z)\right]}$

A 1.3.6. $E_0 = 105$ V m$^{-1}$, $H_0 = 0{,}278$ A m$^{-1}$

A 1.3.7. $E_{0a} = E_{0b} = 80{,}6$ V m$^{-1}$, $H_{0a} = H_{0b} = 0{,}342$ A m$^{-1}$

A 1.3.8. $\boldsymbol{E}_1 \times \boldsymbol{H}_1 = \boldsymbol{E}_2 \times \boldsymbol{H}_2$; $(\boldsymbol{E}_1 - \boldsymbol{E}_2) \times \boldsymbol{n} = 0$, $(\boldsymbol{H}_1 - \boldsymbol{H}_2) \times \boldsymbol{n} = 0$,

das bedeutet Gleichheit der Tangentialkomponenten (vgl. 2.1.).

A 1.3.9. $$\begin{pmatrix} x' \\ y' \\ z' \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & -\sin\xi & \cos\xi \\ 0 & \cos\xi & \sin\xi \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} -\sin\varepsilon & 0 & \cos\varepsilon \\ 0 & 1 & 0 \\ \cos\varepsilon & 0 & \sin\varepsilon \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix}$$

A 1.3.10. $x = \frac{-e^2{E_0}^2c}{8\gamma^2\omega^3}\sin 2(\omega t - kx)$, $y = \frac{eE_0c}{\gamma\omega^2}\cos(\omega t - kx)$, $z = 0$;

$p_x = -\frac{e^2{E_0}^2}{4\gamma\omega^2}\cos 2(\omega t - kx)$, $p_y = \frac{eE_0}{\omega}\sin(\omega t - kx)$, $p_z = 0$;

$\gamma^2 = m^2c^2 + \frac{e^2{E_0}^2}{2\omega^2}$, **Richtung $\boldsymbol{E}$ ist mit der $y$-Achse identisch.**

A 1.3.11. Ein Kreis: $x = 0,\ y = -\dfrac{ecE_0}{\gamma\omega^2}\cos\omega t,\ z = -\dfrac{ecE_0}{\gamma\omega^2}\sin\omega t;$

$$p_x = 0,\ p_y = \frac{eE_0}{\omega}\sin\omega t,\ p_z = -\frac{eE_0}{\omega}\cos\omega t$$

A 1.3.12. $E_{0x} = 137\ \mathrm{V\ m^{-1}},\ E_{0y} = 109\ \mathrm{V\ m^{-1}}$

A 1.4.1. $\omega_\mathrm{p} = 3{,}98\cdot 10^{11}\ \mathrm{s^{-1}},\ n = 0{,}998,\ \gamma = 1{,}8\cdot 10^{-3}\ \Omega^{-1}\ \mathrm{m^{-1}}$

A 1.4.2. $n \to \infty,\ \varkappa \to 1$

A 1.4.3. $\dfrac{2\pi c\sqrt{\varepsilon_0 m_\mathrm{e}}}{eN} \geqq \lambda \gg \dfrac{1}{\sqrt[3]{N}}$, d. h. $\dfrac{2\pi c\sqrt{\varepsilon_0 m_\mathrm{e}}}{e} \gg \sqrt[6]{N},\quad N \gtreqless 10^{45}\ \mathrm{m^{-3}}$

A 1.4.4. $L\ddot{I} + \dfrac{R}{L}\dot{I} + \dfrac{1}{C}I = \dot{U},\quad I = I_0\dfrac{e^{i\omega t}}{\omega_0{}^2 - \omega^2 + i\omega\dfrac{R}{L}},\quad \omega_0 = \sqrt{\dfrac{1}{LC}}$

A 1.4.5. $n^2 = 1{,}96 + \dfrac{7{,}04\lambda^2}{\lambda^2 - \lambda_0{}^2},\quad \lambda_0{}^2 = 2{,}65\cdot 10^{-12}\ \mathrm{m}^2$

A 1.4.6. $n^2 = 1{,}09 + \dfrac{0{,}900\lambda^2}{\lambda^2 - \lambda_0{}^2},\quad \lambda_0 = 28{,}5\ \mathrm{nm}$

A 1.4.7. $\Delta\lambda = 26{,}96\ \mathrm{nm},\ \varrho_0 = 1{,}51\cdot 10^{15}\ \mathrm{s^{-1}},\ \tau = 0{,}659\cdot 10^{-15}\ \mathrm{s}$

A 1.4.8. $(\Delta f)_{1/4} = \dfrac{\sqrt{3}\,\varrho_0}{2\pi}$

A 1.4.9. $\varrho_0 = 1{,}74\cdot 10^{14}\ \mathrm{s^{-1}},\ \Delta n_{\max} = 1{,}485\cdot 10^{-4}$

A 1.4.10. $\tau = 1{,}32\cdot 10^{-15},\ N = 3{,}13\cdot 10^{23}\ \mathrm{m^{-3}}$

A 1.4.11. $y = t/2$ für $-\pi < t < \pi$, periodisch wiederholt

A 1.4.12. $y = \dfrac{\pi}{2} - \dfrac{4}{\pi}\sum\limits_{\nu=0}^{\infty}\dfrac{\cos(2\nu+1)t}{(2\nu+1)^2};\quad y = \dfrac{4}{\pi}\sum\limits_{\nu=0}^{\infty}\dfrac{\sin(2\nu+1)t}{2\nu+1}$

A 1.4.13. $\tilde{y}(\omega) = \dfrac{2\alpha}{\alpha^2 + \omega^2}$

A 1.4.14. $\tilde{y} = \dfrac{2A\sin\omega a}{\omega}$

A 1.4.15. $\delta(t)$ Deltafunktion

A 1.4.16. $\Delta t \geqq 6{,}3\cdot 10^{-9}\ \mathrm{s},\ \Delta f \geqq 1{,}6\cdot 10^8\ \mathrm{Hz}$

A 1.5.1. Für den Übergang zwischen zwei Medien e und d gilt $\dfrac{\sin\alpha_\mathrm{e}}{\sin\alpha_\mathrm{d}} = \dfrac{p_\mathrm{e}}{p_\mathrm{d}} = \dfrac{v_\mathrm{e}}{v_\mathrm{d}}$. Mit $n = Cp$ und dem Energiesatz $\dfrac{m}{2}v^2 + W_\mathrm{pot} = W$ folgt $n = C\sqrt{W - W_\mathrm{pot}} = \sqrt{\dfrac{W - W_\mathrm{pot}}{W}}$ mit $C = \dfrac{1}{\sqrt{W}}$.

A 1.5.2. Aus dem Energiesatz $\frac{m_e c^2}{\sqrt{1-\frac{v^2}{c^2}}} + W_{pot} = m_0 c^2 + W$ folgt mit

$$p = \frac{m_0 v}{\sqrt{1-\frac{v^2}{c^2}}} \qquad n = \frac{W - W_{pot}}{W}\left[1 + \frac{1}{2m_0c^2}(W - W_{pot})\right].$$

A 1.5.3. Die Lichtwege müssen nach dem FERMATschen Prinzip konstant sein. Legt man die $x$-Achse durch $P_1(x_1, 0)$, $P_2(x_2, 0)$, so erhält man für die Koordinaten der Lösungsfläche $n_1\sqrt{(x-x_1)^2+y^2} + n_2\sqrt{(x-x_2)^2+y^2} = C$ mit $C = -n_1x_1 + n_2x_2$.

A 1.5.4. ABBEsche Sinusbedingung: $\frac{n_1 \sin u_1}{n_2 \sin u_2} = \frac{y_2}{y_1}$

A 1.5.5. HERSCHELsche Tiefenschärfenbedingung:

$$n_1\,dx_1 \sin^2\frac{u_1}{2} = n_2\,dx_2 \sin^2\frac{u_2}{2}$$

A 1.5.6. $u_2 = 1°37'$

A 1.5.7. $u_2 = 7°42'$

A 1.5.8. $u_1 = 15°10'$

A 1.5.9. $u_1 = 8°45'$

A 2.1.1. $n_{12} \leqq 0{,}717$

A 2.1.2. $\sin^2\alpha > \frac{1}{2}\left[\frac{3}{4}\sqrt{2} + 1 - \left(\frac{3}{4}\sqrt{2} - 1\right)n_{12}^2\right], \quad \alpha \geqq 81°13'$

A 2.1.3. $R_p = \frac{1-n}{1+n}, \quad D_p = 1 + R_p; \quad R_s = \frac{n-1}{n+1}, \quad D_s = \frac{1+R_s}{n}$

A 2.1.4. $R_p = \frac{\sin(\alpha_d - \alpha)}{\sin(\alpha_d + \alpha)}, \quad D_p = 1 + \frac{\sin(\alpha_d - \alpha)}{\sin(\alpha_d + \alpha)};$

$$R_s = \frac{\tan(\alpha - \alpha_d)}{\tan(\alpha + \alpha_d)}, \quad D_s = \left(\frac{\tan(\alpha + \alpha_d)}{\cos(\alpha - \alpha_d)} - \frac{\tan(\alpha - \alpha_d)}{\cos(\alpha + \alpha_d)}\right)\frac{1}{\tan(\alpha + \alpha_d)}$$

A 2.1.5. $R_p = \frac{1-n}{1+n}\left(1 + \frac{\alpha^2}{n}\right), \quad R_s = \frac{n-1}{n+1}\left(1 - \frac{\alpha^2}{n}\right)$

A 2.1.6. $r = 0{,}1375$

A 2.1.7. $\alpha = 37°27'$, $D_s = 0{,}625$

A 2.1.8. $r = 0{,}118, \quad r(\alpha_{pol}) = \frac{1}{2}\left(\frac{1-n^2}{1+n^2}\right)^2$

A 2.1.9. $\frac{D_s}{D_p} = \frac{1+n^2}{2n}$. Beim entgegengesetzten Übergang ist $n$ durch $1/n$ zu ersetzen, was auf dasselbe Verhältnis führt. $d = \left(\frac{1+n^2}{2n}\right)^{4m}$, $d = 123{,}8$

A 2.1.10. $\delta_{rs} - \delta_{rp} = 2 \arctan \frac{1 - n_{12}^2}{2n_{12}}, \quad \alpha = \arcsin \sqrt{\frac{2n_{12}^2}{1 + n_{12}^2}},$

$\delta_{rs} - \delta_{rp} = 47{,}9°, \; \alpha = 50{,}4°$

A 2.1.11. $\delta_{rs} - \delta_{rp} = 2 \arctan \frac{\cos \sqrt{\sin^2 \alpha - n_{12}^2}}{\sin^2 \alpha}$

A 2.1.12. $n = \frac{1}{n_{12}} \geqq 2{,}41$

A 2.1.13. $\alpha = 50°20', \; \alpha = 53°10'$

A 2.1.14. $\psi_0 = e^{i\omega t} \, e^{-ik[x\cos(\alpha+\Delta\alpha)+y\sin(\alpha+\Delta\alpha)]}.$

$\psi + \psi_0$ ergibt stehende Wellen. Für $\Delta\alpha \to 0$ erhält man für die Punkte minimaler Schwingung $y = x \tan \alpha$.

A 2.1.15. $y = x \tan \alpha - \frac{1}{k \sin \alpha} \frac{d\delta(\alpha)}{d\alpha}$

A 2.1.16. $\Delta y_p = n_{12} \frac{\lambda}{\pi} \frac{\tan \alpha}{(n_{12}^2 \sin^2 \alpha - \cos^2 \alpha) \sqrt{n_{12}^2 \sin^2 \alpha - 1}},$

$\Delta y_s = n_{12} \frac{\lambda}{\pi} \frac{\tan \alpha}{\sqrt{n_{12} \sin^2 \alpha - 1}}$

A 2.1.17. $p_n = w(1 + r) \cos^2 \alpha$

A 2.1.18. $p_t = w(1 - r) \sin \alpha \cos \alpha$

A 2.1.19. $p_n = 0{,}5 \text{ W cm}^{-2}$

A 2.1.20. Relative Amplitude $-R$

A 2.2.1. p-Polarisation: $z = \frac{\pi}{k \cos \alpha} \left(m + \frac{1}{2}\right), \quad m = 0, 1, 2, \ldots;$

s-Polarisation: $\overline{E^2} \sim \cos^2 \alpha - \cos 2\alpha \sin^2 (kz \cos \alpha)$.

Die durch den ersten Summanden $\cos^2 \alpha$ gegebene gleichmäßige, d. h. von $z$ unabhängige Ausleuchtung ist infolge des zweiten Summanden von schwachen Streifen durchsetzt. Für $\alpha = 45°$ erhält man gleichmäßige Ausleuchtung.

A 2.2.2. $\alpha_g = \arcsin \sqrt{\frac{\varkappa_2 {n_2}^2}{\varkappa_1 {n_1}^2}}$

A 2.2.3. $\frac{n_2}{n_1} > \frac{\varkappa_2}{\varkappa_1}$

A 2.2.4. $\frac{n_2}{n_1} < \frac{\varkappa_2}{\varkappa_1}$

A 2.2.5. $\Delta y_p = \frac{\lambda}{\pi} \tan \alpha_g \sqrt{\frac{\varepsilon_0 \omega}{2\sigma}}$

A 2.2.6. $\alpha = \arcsin \sqrt{\frac{1}{n^2} + \frac{\sigma}{\sqrt{3}\, \varepsilon_0 \omega}}$

A 2.2.7. $R_p = 1 - 4(1 + i)\sqrt{\dfrac{\varkappa}{n}}$, $R_s = 1 - 4(1 + i)\sqrt{\varkappa n}$

A 2.2.8. $R_p = 1 - (1 + i)\, 2{,}9 \cdot 10^{-3}$, $R_s = 1 - (1 + i)\, 3{,}9 \cdot 10^{-3}$

A 2.2.9. $L = 16{,}5$ nm

A 2.2.10. $\varkappa = 0{,}40$

A 2.2.11. $\varphi = 1{,}05$ mrad $= 3'\,36''$

A 3.1.1. $\boldsymbol{y} = \lambda \boldsymbol{A}\boldsymbol{x}$, d. h. $\lambda \boldsymbol{A} = \lambda(a_{ij}) = (\lambda a_{ij})$

A 3.1.2. $\boldsymbol{y} = \lambda(\boldsymbol{A} + \boldsymbol{B})\,\boldsymbol{x}$, d. h. $\lambda(\boldsymbol{A} + \boldsymbol{B}) = \lambda\boldsymbol{A} + \lambda\boldsymbol{B}$

A 3.1.3. Nein; z. B. $\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}$

A 3.1.4. Nachweis durch drei nacheinander erfolgende lineare Transformationen

A 3.1.5. $\boldsymbol{AB} \cdot (\boldsymbol{AB})' = \boldsymbol{AB} \cdot \boldsymbol{B}'\boldsymbol{A}' = \boldsymbol{AA}' = \boldsymbol{1}$

A 3.1.6. $\bar{\boldsymbol{x}} = \boldsymbol{A}\boldsymbol{x}$, $\bar{\boldsymbol{y}} = \boldsymbol{A}\boldsymbol{y}$, $\bar{\boldsymbol{x}}'\bar{\boldsymbol{y}} = \boldsymbol{x}'\boldsymbol{A}'\boldsymbol{A}\boldsymbol{y} = \boldsymbol{x}'\boldsymbol{y}$

A 3.1.7. $\boldsymbol{y}$ Ortsvektor zu den Endpunkten der Fläche, $\boldsymbol{x}$ Flächennormale

A 3.1.8. $\boldsymbol{A} = \boldsymbol{A}_s + \boldsymbol{A}_a$, $\boldsymbol{A}' = \boldsymbol{A}_s - \boldsymbol{A}_a$, $\boldsymbol{A}_s = \dfrac{1}{2}(\boldsymbol{A} + \boldsymbol{A}')$, $\boldsymbol{A}_a = \dfrac{1}{2}(\boldsymbol{A} - \boldsymbol{A}')$;

$$\boldsymbol{A}_s = \begin{pmatrix} 2 & \frac{1}{2} & 0 \\ \frac{1}{2} & 3 & \frac{3}{2} \\ 0 & \frac{3}{2} & -1 \end{pmatrix}, \quad \boldsymbol{A}_a = \begin{pmatrix} 0 & \frac{1}{2} & -1 \\ -\frac{1}{2} & 0 & \frac{1}{2} \\ 1 & -\frac{1}{2} & 0 \end{pmatrix}$$

A 3.1.9. Jede Spiegelung verändert nur die zyklische Variable, wenn die Schnittgerade der Spiegelebenen $z$-Achse ist. Damit folgt: $\boldsymbol{\sigma}_2\boldsymbol{\sigma}_1 = \boldsymbol{C}(2\psi)$. Die Drehung erfolgt von der ersten zur zweiten Spiegelebene hin. Das kommutative Gesetz ist nur für $\psi = 90°$ erfüllt.

A 3.1.10. $\boldsymbol{C}'(\psi') = \boldsymbol{\sigma}_0\boldsymbol{\sigma}_1$, $\boldsymbol{C}''(\psi'') = \boldsymbol{\sigma}_2\boldsymbol{\sigma}_0$, $\boldsymbol{C}''\boldsymbol{C}' = \boldsymbol{\sigma}_2\boldsymbol{\sigma}_0\boldsymbol{\sigma}_0\boldsymbol{\sigma}_1 = \boldsymbol{\sigma}_2\boldsymbol{\sigma}_1 = \boldsymbol{C}(\psi)$

$\boldsymbol{C}'$ und $\boldsymbol{C}''$ spannen $\boldsymbol{\sigma}_0$ auf. $\boldsymbol{\sigma}_1$ ist die Ebene durch $\boldsymbol{C}'$, die mit $\boldsymbol{\sigma}_0$ den Winkel $\psi'/2$ einschließt. Im gleichen Verhältnis stehen $\boldsymbol{\sigma}_2$, $\boldsymbol{C}''$, $\boldsymbol{\sigma}_0$. $\boldsymbol{C}$ ist Schnittgerade von $\boldsymbol{\sigma}_1$ und $\boldsymbol{\sigma}_2$, $\psi$ doppelter Schnittwinkel von $\boldsymbol{\sigma}_1$ und $\boldsymbol{\sigma}_2$.

A 3.1.11. $sp(\boldsymbol{AB}) = \sum\limits_i (ab)_{ii} = \sum\limits_i \sum\limits_j a_{ij}b_{ij} = \sum\limits_{j,i} b_{ji}a_{ij} = \sum\limits_j (ba)_{jj} = sp(\boldsymbol{BA})$

A 3.1.12. $sp(\boldsymbol{ABA}^{-1}) = sp(\boldsymbol{A}^{-1}\boldsymbol{AB}) = sp(\boldsymbol{B})$

A 3.1.13. $sp\boldsymbol{C}_n = 1 + 2\cos\varphi$, $sp\boldsymbol{S}_n = -1 + 2\cos\varphi$,

$sp^{(\mathrm{R})}\boldsymbol{C}_n = 1 + 2\cos\varphi$, $sp^{(\mathrm{R})}\boldsymbol{S}_n = 1 - 2\cos\varphi$ (vgl. 6.2.5.)

A 3.2.1. $(\varepsilon^{-1})_{11} = \dfrac{1}{\varepsilon_{\mathrm{I}}}$, $(\varepsilon^{-1})_{22} = \dfrac{1}{\varepsilon_{\mathrm{II}}}$, $(\varepsilon^{-1})_{33} = \dfrac{1}{\varepsilon_{\mathrm{III}}}$

A 3.2.2. Ausgangsgleichungen sind die Ebenengleichung und die Gleichung des Indexellipsoids. Nach Multiplikation mit LAGRANGEschen Multiplikatoren erhält man,

da die partiellen Ableitungen nach $D_x$, $D_y$, $D_z$ verschwinden müssen,

$$\frac{\cos^2\alpha}{u_{\rm I}^2 - \frac{c^2}{\lambda_2}} + \frac{\cos^2\beta}{u_{\rm II}^2 - \frac{c^2}{\lambda_2}} + \frac{\cos^2\gamma}{u_{\rm III}^2 - \frac{c^2}{\lambda_2}} = 0, \quad \text{d. h.} \quad \lambda_2 = \frac{c^2}{u^2};$$

$$D_x : D_y : D_z = \frac{\cos\alpha}{u^2 - u_{\rm I}^2} : \frac{\cos\beta}{u^2 - u_{\rm II}^2} : \frac{\cos\gamma}{u^2 - u_{\rm III}^2}, \quad \boldsymbol{D}\cdot\boldsymbol{n} = 0,$$

$$D_x^2 + D_y^2 + D_z^2 = \frac{c}{u_1} \quad \text{bzw.} \quad \frac{c}{u_2}.$$

A 3.2.3. $u_1 = u_{\rm II}$: $D_1 \parallel y$, $H_1 \perp u$, $D$; $u_2 = u_{\rm III}$: $D_2 \parallel z$, $H_2 \parallel y$

A 3.2.4. $F = \cos^2\alpha(u_{\rm II}^2 - u^2)(u_{\rm III}^2 - u^2) + \cos^2\beta(u_{\rm III}^2 - u^2)(u_{\rm I}^2 - u^2)$
$+ \cos^2\gamma(u_{\rm I}^2 - u^2)(u_{\rm II}^2 - u^2)$.

Da $F$ sein Vorzeichen wechselt, folgt

$u_{\rm I}^2 \geqq u_1^2 \geqq u_{\rm II}^2 \geqq u_2^2 \geqq u_{\rm III}^2$, d. h. $u_1^2 = u_2^2 = u_{\rm II}^2$.

Für $u = u_{\rm II}$ folgt $\cos\beta = 0$, $(u_{\rm II}^2 - u^2)\,[\cos^2\alpha\,(u_{\rm III}^2 - u^2) + \sin^2\alpha\,(u_{\rm I}^2 - u^2)] = 0$. Wurzeln sind $u^2 = u_{\rm II}^2$ und $u^2 = \cos^2\alpha\, u_{\rm III}^2 + \sin^2\alpha\, u_{\rm I}^2$. Als Schnittkurve der Ebene $\cos\alpha\, D_x + \cos\gamma\, D_z = 0$ mit dem Indexellipsoid erhält man einmal einen Kreis, das andere Mal eine Ellipse. Optische Achsen:

$$\cos\alpha = \pm\sqrt{\frac{u_{\rm I}^2 - u_{\rm II}^2}{u_{\rm I}^2 - u_{\rm III}^2}}, \quad \cos\beta = 0, \quad \cos\gamma = \pm\sqrt{\frac{u_{\rm II}^2 - u_{\rm III}^2}{u_{\rm I}^2 - u_{\rm III}^2}}.$$

Für $u_{\rm I} = u_{\rm II}$ erhält man nur eine optische Achse (0, 0, 1).

A 3.2.5. Schnittkurve entartet in einen Kreis. Man erhält unendlich viele Schwingungsrichtungen für $\boldsymbol{D}$.

A 3.2.6. Die Wellen pflanzen sich mit gleicher Geschwindigkeit fort.

A 3.2.7. $$u_1^2 = \frac{1}{2}(u_{\rm I}^2 + u_{\rm III}^2) + \frac{1}{2}(u_{\rm I}^2 - u_{\rm III}^2)\cos(\Omega_1 - \Omega_2),$$

$$u_2^2 = \frac{1}{2}(u_{\rm I}^2 + u_{\rm III}^2) + \frac{1}{2}(u_{\rm I}^2 - u_{\rm III}^2)\cos(\Omega_1 + \Omega_2)$$

A 3.2.8. Zwei Strahlrichtungen $\boldsymbol{s}_1$ und $\boldsymbol{s}_2$ mit $\boldsymbol{E}_1\cdot\boldsymbol{E}_2 = 0$

A 3.2.9. Unendlich viele Strahlrichtungen

A 3.2.10. Unendlich viele Normalenrichtungen

A 3.2.11. Der ordentliche Strahl wird totalreflektiert. Der außerordentliche läuft im Medium II parallel zu seiner Richtung im Medium I. Er ist linear polarisiert.

A 3.2.12. $E = 3{,}01$ MV m$^{-1}$

A 3.2.13. $E_0 = 6{,}41$ MV m$^{-1}$

A 3.2.14. $E = 1{,}68$ MV m$^{-1}$

A 3.2.15. $D_x = D_1\cos(\omega t + \delta_1')$, $D_y = D_2\cos(\omega t + \delta_2')$,

$$\delta_1' - \delta_1 = \frac{2\pi}{\lambda_0}(n_e\delta_1 + n_o\delta_2), \quad \delta_2' - \delta_2 = \frac{2\pi}{\lambda_0}(n_o\delta_1 + n_e\delta_2),$$

$$\delta_2' - \delta_1' = \delta_2 - \delta_1 + \frac{2\pi}{\lambda_0}(n_o - n_e)(\delta_1 - \delta_2).$$

A 3.2.16. Durch den Polarisator wird das einfallende Licht linear polarisiert: $\delta_1 = \delta_2 \pmod{\pi}$. Dunkle Linien kennzeichnen $\delta_1' = \delta_2' \pmod{\pi}$. Nach Entfernen des Polarisators liegt wieder das zu messende Licht mit $\delta_1 - \delta_2 = \Delta\delta$ vor. Es verschiebt dunkle Linien um $\Delta a = \dfrac{a\,\Delta\delta}{\pi}$. Für das durchgehende Licht folgt $\left|\dfrac{D_y}{D_x}\right| = \cot \Delta\varphi = \dfrac{D_2}{D_1}$; $\Delta\delta = 24{,}5°$, $\dfrac{D_2}{D_1} = 1{,}428$.

A 3.3.1. $c = 6{,}52\ \mathrm{g\,l^{-1}}$

A 3.3.2. $l_{\mathrm{opt}} = 0{,}26\ \mathrm{m}, \quad \dfrac{W_{\mathrm{opt}}}{W_0} = 0{,}125$

A 3.3.3.
$$D_x = \varepsilon_{\mathrm{I}} E_x - \mathrm{i}G_z E_y + \mathrm{i}G_y E_z,$$
$$D_y = \mathrm{i}G_z E_x + \varepsilon_{\mathrm{II}} E_y - \mathrm{i}G_x E_z,$$
$$D_z = -\mathrm{i}G_y E_x + \mathrm{i}G_x E_y + \varepsilon_{\mathrm{III}} G_z$$

A 3.3.4.
$$n^4(n_{\mathrm{I}}^2 \cos^2\alpha + n_{\mathrm{II}}^2 \cos^2\beta + n_{\mathrm{III}}^2 \cos^2\gamma) - n^2 \sum n_{\mathrm{II}}^2 n_{\mathrm{III}}^2 \sin^2\alpha + n^2(\boldsymbol{s} \times \boldsymbol{G})^2$$
$$+ n_{\mathrm{I}}^2 n_{\mathrm{II}}^2 n_{\mathrm{III}}^2 - (n_{\mathrm{I}}^2 G_x^2 + n_{\mathrm{II}}^2 G_y^2 + n_{\mathrm{III}}^2 G_z^2) = 0$$

A 3.3.5.
$$(n^2 - n_{01}^2)(n^2 - n_{02}^2) = g^2,$$
$$g = \frac{n_{\mathrm{I}}^2 G_x^2 + n_{\mathrm{II}}^2 G_y^2 + n_{\mathrm{III}}^2 G_z^2 - n^2(\boldsymbol{s} \cdot \boldsymbol{G})^2}{n_{\mathrm{I}}^2 \cos^2\alpha + n_{\mathrm{II}}^2 \cos^2\beta + n_{\mathrm{III}}^2 \cos^2\gamma}$$

A 3.3.6.
$$n_{1,2}^2 = \frac{1}{2}\left(n_{01}^2 + n_{02}^2 \pm \sqrt{n_{01}^2 - n_{02}^2 + 4g^2}\right), \quad g = \boldsymbol{s} \cdot \boldsymbol{G}$$

A 3.3.7.
$$n_{\mp} = n_{\mathrm{s}}\left(1 \mp \frac{g}{2} \cos\gamma\right)$$
$$\sin\gamma_{\pm} = \frac{\sin^2\varphi}{n_{\mathrm{s}}} \pm \frac{g \sin\varphi}{2n_{\mathrm{s}}} \sqrt{1 - \frac{\sin^2\varphi}{n_{\mathrm{s}}^2}}$$
$$\sin\gamma_+ = 0{,}2258, \quad \sin\gamma_- = 0{,}2162$$

A 3.3.8.
$$\frac{D_{\mathrm{p}}}{D_{\mathrm{s}}} = \mathrm{i}g \frac{n^2 \cos\gamma}{n^2 - n_{\mathrm{s}}^2 + g^2 n_{\mathrm{s}}^2}$$

A 3.3.9.
$$E_x : E_y : E_z = (n^2 - n_{\mathrm{s}}^2) : \mathrm{i}g n_{\mathrm{s}}^2 : \tan\gamma\,(n^2 - n_{\mathrm{s}}^2 + g^2 n_{\mathrm{s}}^2)$$

A 3.3.10.
$$-R_{\mathrm{s}} \cos\varphi = \frac{D_{\mathrm{s}+} \cos\gamma_+ + \mathrm{i}g D_{\mathrm{p}+} + D_{\mathrm{s}-} \cos\gamma_- + \mathrm{i}g D_{\mathrm{p}-}}{\varepsilon_0 n_{\mathrm{s}}^2 (1 - g^2)},$$
$$E_{\mathrm{p}} + R_{\mathrm{p}} = \frac{D_{\mathrm{p}+} - \mathrm{i}g D_{\mathrm{s}+} \cos\gamma_+ + D_{\mathrm{p}-} - \mathrm{i}g D_{\mathrm{s}-} \cos\gamma_-}{\varepsilon_0 n_{\mathrm{s}}^2 (1 - g^2)},$$
$$-\sqrt{\frac{\varepsilon_0}{\mu_0}}\, E_{\mathrm{p}} \cos\varphi + R_{\mathrm{p}} \sqrt{\frac{\varepsilon_0}{\mu_0}} \cos\varphi$$
$$= -\frac{(D_{\mathrm{p}+} - \mathrm{i}g D_{\mathrm{s}+} \cos\gamma_+) \cos\gamma_+ + (D_{\mathrm{p}-} - \mathrm{i}g D_{\mathrm{s}-} \cos\gamma_-) \cos\gamma_-}{\sqrt{\varepsilon_0 \mu_0}\; n_{\mathrm{s}}^2 (1 - g^2)},$$
$$R_{\mathrm{s}} \sqrt{\frac{\varepsilon_0}{\mu_0}} = \frac{D_{\mathrm{s}+} + \mathrm{i}g D_{\mathrm{p}+} \cos\gamma_+ + D_{\mathrm{s}-} + \mathrm{i}g D_{\mathrm{s}-} \cos\gamma_-}{\sqrt{\varepsilon_0 \varepsilon_0}\; n_{\mathrm{s}}^2 (1 - g^2)}$$

A 3.3.11. $R_s = r_{12}E_p, \quad R_p = r_{22}E_p;$

$$r_{12} = \frac{-in_s g \cos\varphi}{(n_s + \cos\varphi)(n_s \cos\varphi + 1)},$$

$$r_{22} = \frac{\cos\varphi - \sqrt{n_s^2 - \sin^2\varphi}}{\cos\varphi + \sqrt{n_s^2 - \sin^2\varphi}}$$

A 3.3.12. $r_{12}$ und $r_{22}$ nach A 3.3.11.; $r_{21} = r_{12}, \; r_{11} = \dfrac{\cos\varphi - n_s}{\cos\varphi + n_s}$

A 3.3.13. $\dfrac{R_s^2}{R_p^2} = \dfrac{|r_{12}|^2}{|r_{22}|^2} = 1{,}7 \cdot 10^{-4}$

A 3.3.14. $r_{11} = \dfrac{\cos - n_s}{\cos + n_s}, \quad r_{22} = \dfrac{\cos\varphi - \sqrt{n_s^2 - \sin^2\varphi}}{\cos\varphi + \sqrt{n_s^2 - \sin^2\varphi}},$

$$r_{12} = -r_{21} = -\frac{ig\cos\varphi\sin\varphi}{(\cos\varphi + n_s)(n_s\cos\varphi + 1)}$$

A 3.3.15. $\dfrac{R_p e^{i\delta_{rp}}}{R_s e^{i\delta_{rs}}} = -\dfrac{A_p}{A_s}\,\dfrac{\cos\varphi - \sqrt{n^2 - \sin^2\varphi}}{\cos\varphi + \sqrt{n^2 - \sin^2\varphi}}\,\dfrac{\sqrt{n^2 - \sin^2\varphi} + n^2\cos\varphi}{\sqrt{n^2 - \sin^2\varphi} - n^2\cos\varphi}$

$$\times \left(1 - \frac{ign^2\sin^2\varphi}{n^2 - \sin^2\varphi - n^4\cos^2\varphi}\right)$$

A 4.1.1. $\delta = \dfrac{2k+1}{2}\,\pi \quad (k = 0, \pm 1, \pm 2, \ldots)$

A 4.1.2. $d = 0{,}62$ mm

A 4.1.3. $(\sin\vartheta_0 - \sin\vartheta)\, d = h\lambda \quad (h = 0, \pm 1, \ldots)$ Maximum,

$(\sin\vartheta_0 - \sin\vartheta)\, d = \left(h + \dfrac{1}{2}\right)\lambda \quad (h = 0, \pm 1, \ldots)$ Minimum

A 4.1.4. Intensitätsmaxima für $\sin\vartheta = \dfrac{h\lambda}{d}$ und $\sin(\vartheta' - \varepsilon) = \dfrac{h'\lambda}{d}$. Beste Sichtbarkeit für $\sin\vartheta = \sin\vartheta'$, d. h. $d = \dfrac{(h - h')\,\lambda}{\varepsilon}$. Abstand zwischen zwei Einstellungen:

$\Delta d = \dfrac{\lambda}{\varepsilon}, \quad \varepsilon = 4{,}8 \cdot 10^{-6}$ rad $= 0{,}99''$

A 4.1.5. $L = hp\lambda, \quad \dfrac{\lambda}{\Delta\lambda} = \dfrac{L}{\lambda}$

A 4.1.6. $\dfrac{\lambda}{\Delta\lambda} = 2 \cdot 10^4$

A 4.1.7. $\Delta\lambda = 1 \cdot 10^{-10}$ m

A 4.1.8. $h = 253, \; \lambda_0 = 600{,}7$ nm; $\; h = 254, \; \lambda_0 = 598{,}4$ nm

A 4.1.9. $B = 2b \sin \psi = \dfrac{\lambda \tan \psi}{\Delta\lambda \left| \dfrac{dn}{d\lambda} \right|}$, $B = 9{,}14$ cm

A 4.1.10. $\vartheta = 70{,}5°$

A 4.1.11. $\dfrac{\lambda}{\Delta\lambda} = 50000$

A 4.1.12. $\dfrac{1}{(1-r)^2 + 4r} < \dfrac{EE^*}{E_0^2} < \dfrac{1}{(1-r)^2}$ bzw. $1 - 2r < \dfrac{EE^*}{E_0^2} < 1 + 2r$

A 4.1.13. $\dfrac{\lambda}{\Delta\lambda} = 1{,}98 \cdot 10^6$

A 4.1.14. $h = 1{,}03 \cdot 10^5$, $\dfrac{\lambda}{\Delta\lambda} = 6{,}68 \cdot 10^6$

A 4.1.15. $\Delta l = \dfrac{\lambda}{2}$

A 4.1.16. Ost-West-Achse: $t = \dfrac{l}{c+v} + \dfrac{l}{c-v}$. Die Bewegung auf der Nord-Süd-Achse erfolgt schneller: $t' = \dfrac{2l}{c\sqrt{1 - \dfrac{v^2}{c^2}}}$, $t - t' = \dfrac{2l}{c}\dfrac{v^2}{2c^2}$. Das entspricht $c\dfrac{t-t'}{\lambda}$ Streifen.

A 4.1.17. Wegen der längentreuen Abbildung entstehen zwei virtuelle Lichtquellen der Breite $D$. Die Zerlegung in elementare Strahler und Integration liefert nach (4.1.6./4), da keine Kohärenz vorliegt,

$$EE^* = \frac{4E_0^2}{D} \int_0^D \cos^2 (kx \sin \vartheta)\, dx.$$

A 4.1.18. $EE^* = 2E_0^2$ für $D = \dfrac{\lambda}{2 \sin \vartheta}$ nach A 4.1.17., $D = 1{,}03$ mm

A 4.1.19. $\vartheta = \dfrac{d}{2A}$, $d = 38$ cm

A 4.1.20. $d = 0{,}064$ mm, $\vartheta = 2{,}1 \cdot 10^{-16}$ rad $= 4{,}3 \cdot 10^{-11}{}''$

A 4.1.21. Wegen $\alpha \ll 1$, $\beta \ll 1$ lautet die Bedingung für das Hauptmaximum $d(\alpha - \beta) = h\lambda$ ($h = 0, \pm 1, \ldots$). Sind $\alpha$ und $\alpha + \varepsilon$ die Einfallswinkel, folgt $\Delta\beta = \varepsilon - \dfrac{\Delta h}{d}\lambda$. Die Streifen fallen für

$$\Delta\beta = 0 \quad \text{bzw.} \quad \varepsilon = \Delta h \frac{\lambda}{d} \quad (\Delta h = 0, \pm 1, \ldots)$$

aufeinander. Damit folgt $\varepsilon = 1{,}34 \cdot 10^{-7}$ rad, $D = 6{,}7 \cdot 10^{11}$ m.

A 4.1.22. Soll keine gleichmäßige Ausleuchtung, sondern Interferenz auftreten, muß $D \ll \dfrac{\lambda}{2 \sin \vartheta}$ sein.

A 4.2.1. $\displaystyle\int_V (\psi_1 \,\Delta\psi_2 + \operatorname{grad} \psi_1 \operatorname{grad} \psi_2)\, dV = \int_A \psi_1 \operatorname{grad} \psi_2 \, dA.$

Durch Vertauschen von $\psi_1$ und $\psi_2$ und Subtraktion ergibt sich der GREENsche Satz

$$\int_V (\psi_1 \triangle\psi_2 - \psi_2 \triangle\psi_1)\, \mathrm{d}V = \int_A (\psi_1 \operatorname{grad} \psi_2 - \psi_2 \operatorname{grad} \psi_1)\, \mathrm{d}A$$

A 4.2.2. $\psi = -\dfrac{\mathrm{i}\psi_0}{\lambda} \displaystyle\int_A \dfrac{\mathrm{e}^{-\mathrm{i}kr}}{r}\, \mathrm{d}A = -\dfrac{\mathrm{i}\psi_0}{\lambda r} \displaystyle\int_A \mathrm{e}^{-\mathrm{i}kr}\, \mathrm{d}A$

A 4.2.3. Wegen der Symmetrie von $r$ und $r'$ im HUYGENSschen Prinzip ändert die Vertauschung von $Q$ und $P$ nichts am Beugungsbild.

A 4.2.4. Hauptmaxima 3., 6., 9. Ordnung usw. fallen aus.

A 4.2.5. $\Delta\beta = 0{,}61\, \dfrac{\lambda}{a}$; $\Delta\beta = 1{,}83 \cdot 10^{-4}$ rad $= 38''$ bzw. $3{,}66 \cdot 10^{-6}$ rad $= 0{,}75''$

A 4.2.6. $\Delta\beta = 1{,}83 \cdot 10^{-9}$ rad, relativ zum Auge $10^{-5}$

A 4.2.7. $v = 1{,}6 \cdot 10^6$ m s$^{-1}$

A 4.2.8. $\dfrac{\psi\psi^*}{\psi_0\psi_0^*} = \dfrac{R^2}{4(R^2 + a^2)}$, d. h. $\dfrac{\psi\psi^*}{\psi_0\psi_0^*} = 0{,}225$

A 4.2.9. $\dfrac{\psi_1\psi_1^*}{\psi_{100}\psi_{100}^*} = \dfrac{N_2^2}{N_1^2} = 10^{-4}$

A 4.2.10. Das Staubteilchen $(x_\nu, y_\nu, 0)$ liefert die Feldstärke

$$\psi_\nu = \psi_0\, \mathrm{e}^{-\mathrm{i}k[(x-x_\nu)\cos\beta_1 + (y-y_\nu)\cos\beta_2 + z\cos\beta_3]},$$

wobei (0, 0, 0) Punkt der Scheibe auf der Verbindungslinie Lichtquelle — Auge ist, der die Intensität $\psi_0$ hat. Die gesamte Feldstärke ist

$$\psi = \psi_0\, \mathrm{e}^{-\mathrm{i}kz\cos\gamma_3} \sum_\nu \mathrm{e}^{-\mathrm{i}k[(x-x_\nu)\cos\beta_1 + (y-y_\nu)\cos\beta_2]}.$$

Der Betrag von $N$ stochastisch in der Ebene verteilten Einheitsvektoren ist $\sqrt{N}$, d. h., es ist $\psi\psi^* = N\psi_0\psi_0^*$. Bei regelloser Anordnung der Beugungsscheiben addieren sich die Intensitäten, nicht wie beim Gitter die Amplituden. Wegen $\psi_0 \sim I_1(kas)$ mit $s = \sin(\boldsymbol{n}, \boldsymbol{r})$ tritt das erste Beugungsminimum für $s_1 = 0{,}61\, \dfrac{\lambda}{a} = 0{,}0915$, $(\boldsymbol{n}, \boldsymbol{r}) = 5{,}25°$ auf. Die Intensität ist gegen die einzelne Beugungsscheibe um den Faktor 10000 verstärkt.

A 4.2.11. $\psi(P) = -\dfrac{\mathrm{i}}{\lambda} \displaystyle\int_A \dfrac{\mathrm{e}^{-\mathrm{i}k(r+r')}}{rr'} \cos(\boldsymbol{n}, \boldsymbol{r})\, \mathrm{d}A$

A 4.2.12. $r = R$, $r' = R'$, $\cos(\boldsymbol{n}, \boldsymbol{r}) = c_1$, $\cos(\boldsymbol{n}, \boldsymbol{r}') = c_1'$;

$$r = R - x_0 \cos\alpha - y_0 \cos\beta + \frac{x_0^2 + y_0^2 - (x_0 \cos\alpha + y_0 \cos\beta)^2}{2R}$$

$$r' = R' + x_0 \cos\alpha_0 + y_0 \cos\beta_0 + \frac{x_0^2 + y_0^2 - (x_0 \cos\alpha + y_0 \cos\beta)^2}{2R'}$$

(vgl. Beispiel 4.2.3.). Mit

$$\Phi = (\cos\alpha - \cos\alpha_0)\, x_0 + (\cos\beta - \cos\beta_0)\, y_0 - \frac{x_0^2 + y_0^2}{2RR'}(R + R') + \frac{(x_0 \cos\alpha + y_0 \cos\beta)^2}{2R} + \frac{(x_0 \cos\alpha_0 + y_0 \cos\beta_0)^2}{2R'}$$

folgt

$$\psi(P) = -\frac{\mathrm{i}}{\lambda}\,\frac{1}{RR'}\,c_1\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}k(R+R')}\int\limits_A \mathrm{e}^{\mathrm{i}k\Phi}\,\mathrm{d}x_0\,\mathrm{d}y_0.$$

A 4.2.13. Mit $\cos\beta = \cos\beta_0 = 0$, $\cos^2\alpha = \cos^2\alpha_0 = 1 - \cos^2\gamma$ folgt

$$\Phi = \frac{1}{k}\,(-\Phi_\xi x_0{}^2 - \Phi_\eta y_0{}^2)$$

mit

$$\Phi_\xi = \frac{1}{2}\cos^2\gamma\,\frac{k(R+R')}{RR'},\quad \Phi_\eta = \frac{1}{2}\,\frac{k(R+R')}{RR'};$$

$$\psi(P) = -\frac{\mathrm{i}}{\lambda}\,\frac{\cos\gamma}{RR'}\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}k(R+R')}\int\limits_{-a-x_a}^{a+x_a}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\Phi_\xi x_0{}^2}\,\mathrm{d}x_0\int\limits_{-h}^{h}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\Phi_\eta y_0{}^2}\,\mathrm{d}y_0.$$

$x_a$ kennzeichnet den Abstand des Koordinatenanfangspunktes von der Spaltgrenze.

A 5.1.1. $r_n = \dfrac{\varepsilon_0 n^2 h^2}{mZe^2}$, $f_n = \dfrac{mZ^2e^4}{4\varepsilon_0{}^2 n^3 h^3}$, $W_n = -\dfrac{mZ^2e^4}{8\varepsilon_0{}^2 h^3}$

A 5.1.2. $W_{\text{ion}} = -Z^2 \cdot 13{,}6\ \text{eV}$

A 5.1.3. Die Frequenzen und Wellenzahlen betragen angenähert das Vierfache der entsprechenden Linien für Wasserstoff:

$$\frac{4f_{\mathrm{H}}}{f_{\mathrm{He}}} = \frac{R_{\mathrm{H}}}{R_{\mathrm{He}}} = 1 - 0{,}0004$$

A 5.1.4. $$m_a = \frac{R_{\mathrm{He}} - R_{\mathrm{H}}}{\dfrac{R_{\mathrm{H}}}{m_{\mathrm{H}}} - \dfrac{R_{\mathrm{He}}}{m_{\mathrm{He}}}}$$

A 5.1.5. $$\frac{f_{\mathrm{H}}}{f_{\mathrm{D}}} = 1 - 0{,}00025$$

A 5.1.6. $$C = \frac{1}{\sqrt{\pi a_1{}^3}} = 1{,}5\cdot 10^{15}\ \mathrm{m}^{-3/2}$$

A 5.1.7. a) $\psi = \dfrac{C_1\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}kr}}{r} + \dfrac{C_2\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}kr}}{r}$, $|C_1| = |C_2|$, da im stationären Zustand Strom der ein- und der auslaufenden Größen gleich sein muß;

b) $\psi = \dfrac{C_1\,\mathrm{e}^{-\lambda r}}{r} + \dfrac{C_2\,\mathrm{e}^{\lambda r}}{r}$, $C_2 = 0$

A 5.1.8. $$a_{\nu+1} = \frac{2(\alpha\nu - Z)}{(\nu+1)\,\nu}\,a_\nu$$

A 5.1.9. $$m = |3|:\ |\psi_{33}|^2 = \frac{35}{64\pi}\sin^2\vartheta,$$

$$m = |2|:\ |\psi_{32}|^2 = \frac{105}{32\pi}\sin^4\vartheta\cos^2\vartheta,$$

$m = |1|$: $|\psi_{21}|^2 = \frac{21}{64\pi} \sin^2 \vartheta \, (5 \cos^2 \vartheta - 1)^2$,

$m = 0$: $|\psi_{30}| = \frac{4}{16\pi} (5 \cos^3 \vartheta - 3 \cos \vartheta)^2$

A 5.1.10. $hf = eU$, $1 \text{ eV} \triangleq 8{,}0659 \cdot 10^5 \text{ m}^{-1}$

A 5.1.11. $eU = kT$, $1\text{K} \triangleq 8{,}617 \cdot 10^{-5} \text{ V}$

A 5.2.1. $T_e = \frac{2}{5} m_e r_e^2$, $\frac{e^2}{r_e} = m_e c^2$, Eigendrehimpuls $s = T_e w = \frac{\hbar}{2}$,

$v = r_e w = \frac{5s}{2m_e r_e}$, numerisch $v \approx 150c \gg c$

A 5.2.2. $s_n = 7{,}4$

A 5.2.3. $Z = 61$

A 5.2.4. $S = 0$, $r = 2S + 1 = 1$

A 5.2.5. $S = 1$, $r = 3$

A 5.2.6. Parazustand: $S = 0$, $r = 2S + 1 = 1$, Singulett;
Orthozustand: $S = 1$, $r = 3$, Triplett;
für $L = 0$ nur eine Linie

A 5.2.7. $2\uparrow 1\downarrow$: $S = \frac{1}{2}$, $r = 2$, Dublett; $3\uparrow$: $S = \frac{3}{2}$, $r = 4$, Quartett

A 5.2.8. $3\uparrow 3\downarrow$: $S = 0$, $r = 1$; $4\uparrow 2\downarrow$: $S = 1$, $r = 3$;
$5\uparrow 1\downarrow$: $S = 2$, $r = 5$; $6\uparrow$: $S = 3$, $r = 7$

A 5.2.9.

| | $L$ | $S$ | $J$ | $M_L$ | $M_S$ | Gesamtanzahl | Term |
|---|---|---|---|---|---|---|---|
| Parazustände | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 1 | $^1S_0$ |
| | 1 | 0 | 1 | $0, \pm 1$ | 0 | 3 | $^1P_1$ |
| | 2 | 0 | 2 | $0, \pm 1, \pm 2$ | 0 | 5 | $^1D_2$ |
| Orthozustände | 0 | 1 | 1 | 0 | $0, \pm 1$ | 3 | $^3S_1$ |
| | 1 | 1 | 0, 1, 2 | $0, \pm 1$ | $0, \pm 1$ | 9 | $^3P_{0,1,2}$ |
| | 2 | 1 | 1, 2, 3 | $0, \pm 1, \pm 2$ | $0, \pm 1$ | 15 | $^3D_{1,2,3}$ |

A 5.2.10. $\frac{\lambda}{\Delta\lambda} = 2{,}2 \cdot 10^5$

A 5.2.11. $\frac{e}{m} = 1{,}759 \cdot 10^{11} \text{ As kg}^{-1}$

A 5.2.12. $\frac{\Delta\lambda}{\lambda^2} < 46{,}8 \text{ m}^{-1}$, $\Delta\lambda < 2{,}01 \cdot 10^{-11} \text{ m}$

A 5.2.13. $3^2d_{3/2}$ spaltet in zwei, $2^2p_{1/2}$ ebenfalls in zwei Werte; drei Übergangsmöglichkeiten

A 5.2.14. $\Delta W = -\boldsymbol{B} \cdot (\boldsymbol{m_I} + \boldsymbol{m_J})$ mit $\boldsymbol{m_I}$ nach (5.2.7./2).
$2I + 1$ Einstellmöglichkeiten für $\boldsymbol{I}$, $2J + 1$ für $\boldsymbol{J}$

A 6.1.1. Multiplikation: $0 \cdot 0 = 0$, $(0 \cdot 0) \cdot 0 = 0 \cdot (0 \cdot 0)$, $e = 0$, $0^{-1} = 0$;
Addition: $0 + 0 = 0$, $(0 + 0) + 0 = 0 + (0 + 0)$, $e = 0$, $0^{-1} = 0$.
In beiden Fällen bildet 0 eine Gruppe erster Ordnung.

A 6.1.2. $x = (b^{-1})^2 \cdot a^{-1} \cdot c \cdot a^{-1}$

A 6.1.3. $a \cdot b^{-1} \cdot c^{-1}$, $c^{-2} \cdot a^2 \cdot b^{-2} \cdot c \cdot a^{-1} \cdot b$

A 6.1.4. $\boldsymbol{a} \cdot \boldsymbol{b} = \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 1 & 3 & 2 \end{pmatrix}$, $\boldsymbol{b} \cdot \boldsymbol{a} = \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 3 & 2 & 1 \end{pmatrix}$

A 6.1.5. $\boldsymbol{a}_1 = \begin{pmatrix} 1 & 2 \\ 1 & 2 \end{pmatrix} = e$, $\boldsymbol{a}_2 = \begin{pmatrix} 1 & 2 \\ 2 & 1 \end{pmatrix} = \boldsymbol{a}_2^{-1}$, $\boldsymbol{a}_1 \cdot \boldsymbol{a}_2 = \boldsymbol{a}_2 \cdot \boldsymbol{a}_1$

A 6.1.6. $(1\ \ 5) \cdot (3\ \ 4\ \ 6\ \ 12) \cdot (9\ \ 11\ \ 10)$

A 6.1.7. $\begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 & 4 \\ 2 & 4 & 3 & 1 \end{pmatrix}$

A 6.1.8. $\boldsymbol{1}$ bzw. $\boldsymbol{\sigma}_{\mathrm{h}}$, $\boldsymbol{C}_2$ bzw. $\boldsymbol{\sigma}_{\mathrm{v}}$

A 6.1.9. $(1\ \ 2\ \ 3\ \ 4) = (1\ \ 2) \cdot (2\ \ 3) \cdot (3\ \ 4)$,
$(1\ \ 2\ \ 3\ \ 4\ \ 5) = (1\ \ 2) \cdot (2\ \ 3) \cdot (3\ \ 4) \cdot (4\ \ 5)$;
die Anzahl der Produkte ist entweder stets geradzahlig oder stets ungeradzahlig, sie läßt sich nicht um $\pm 1$ verändern:
$(1\ \ 2\ \ 3\ \ 4) = (1\ \ 2) \cdot (2\ \ 3) \cdot (3\ \ 1) \cdot (1\ \ 3) \cdot (3\ \ 4)$.

A 6.1.10. $(1\ \ 3\ \ 2\ \ 4) \cdot (3\ \ 4) \cdot (2\ \ 3\ \ 4) = (1\ \ 3\ \ 2)$

A 6.1.11.

| | (1) | (1 2) · (3 4) | (1 3) · (2 4) | (1 4) · (2 3) |
|---|---|---|---|---|
| (1) | (1) | (1 2) · (3 4) | (1 3) · (2 4) | (1 4) · (2 3) |
| (1 2) · (3 4) | (1 2) · (3 4) | (1) | (1 4) · (2 3) | (1 3) · (2 4) |
| (1 3) · (2 4) | (1 3) · (2 4) | (1 4) · (2 3) | (1) | (1 2) · (3 4) |
| (1 4) · (2 3) | (1 4) · (2 3) | (1 3) · (2 4) | (1 2) · (3 4) | (1) |

A 6.1.12. Enthält $Z$ die Elemente $a$, $b$, $e$, so folgt
$a \cdot \sigma = \sigma \cdot a$, $b \cdot \sigma = \sigma \cdot b$, $(a \cdot b) \cdot \sigma = a \cdot (b \cdot \sigma) = a \cdot (\sigma \cdot b) = (a \cdot \sigma) \cdot b = (\sigma \cdot a) \cdot b = \sigma \cdot (a \cdot b)$; d. h., $a \cdot b$ liegt in $Z$. Ebenso folgt:
$a^{-1} \cdot a \cdot \sigma = a^{-1} \cdot \sigma \cdot a$, $\sigma = a^{-1} \cdot \sigma \cdot a$, $\sigma \cdot a^{-1} = a^{-1} \cdot \sigma$;
d. h., $a^{-1}$ gehört zu $Z$, das somit eine Untergruppe bildet.

A 6.1.13. $\boldsymbol{1}$ bzw. (1)

A 6.1.14. Gesamte Gruppe, da kommutativ

A 6.1.15. $(\sigma \cdot \tau)^{-1} \cdot \sigma \cdot \tau = e$, $(\sigma \cdot \tau)^{-1} \cdot \sigma = \tau^{-1}$, $(\sigma \cdot \tau)^{-1} = \tau^{-1} \cdot \sigma^{-1}$

A 6.1.16. $\boldsymbol{C} = \boldsymbol{\sigma}_{\mathrm{v}} \cdot \boldsymbol{\sigma}_{\mathrm{v}}'$, $\boldsymbol{C} \cdot \sigma_{\mathrm{h}} = \boldsymbol{\sigma}_{\mathrm{v}} \cdot \boldsymbol{\sigma}_{\mathrm{v}}' \cdot \boldsymbol{\sigma}_{\mathrm{h}} = \boldsymbol{\sigma}_{\mathrm{v}} \cdot \boldsymbol{\sigma}_{\mathrm{h}} \cdot \boldsymbol{\sigma}_{\mathrm{v}}' = \boldsymbol{\sigma}_{\mathrm{h}} \cdot \boldsymbol{\sigma}_{\mathrm{v}} \cdot \boldsymbol{\sigma}_{\mathrm{v}}' = \boldsymbol{\sigma}_{\mathrm{h}} \cdot \boldsymbol{C}$

A 6.1.17. Die Schnittgeraden der vier Ebenen müssen zusammenfallen und die Schnittwinkel einschließlich Vorzeichen gleich sein.

A 6.1.18. $\boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{\sigma}_0 = \boldsymbol{C}(2\psi)$, $\boldsymbol{\sigma} = \boldsymbol{C}(2\psi) \cdot \boldsymbol{\sigma}_0$

A 6.1.19. $\boldsymbol{i} = \boldsymbol{\sigma}_{\mathrm{h}} \cdot \boldsymbol{C}_2 = \boldsymbol{C}_2 \cdot \boldsymbol{\sigma}_{\mathrm{h}}$; $\boldsymbol{C}_n \cdot \boldsymbol{i} = \boldsymbol{C}_n \cdot \boldsymbol{\sigma}_{\mathrm{h}} \cdot \boldsymbol{C}_2 = \boldsymbol{\sigma}_{\mathrm{h}} \cdot \boldsymbol{C}_2 \cdot \boldsymbol{C}_n = \boldsymbol{i} \cdot \boldsymbol{C}_n$

A 6.1.20. $\boldsymbol{i} = \boldsymbol{C}_2 \cdot \boldsymbol{\sigma}_{\mathrm{h}} = \boldsymbol{\sigma}_{\mathrm{h}} \cdot \boldsymbol{C}_2$; $\boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{i} = \boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{C}_2 \cdot \boldsymbol{\sigma}_{\mathrm{h}} = \boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{\sigma}_{\mathrm{h}} \cdot \boldsymbol{C}_2 = \boldsymbol{\sigma}_{\mathrm{h}} \cdot \boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{C}_2 = \boldsymbol{\sigma}_{\mathrm{h}} \cdot \boldsymbol{C}_2 \cdot \boldsymbol{\sigma}$

A 6.1.21. $\boldsymbol{\sigma}_{\mathrm{h}}^2 = \mathbf{1}$; $\boldsymbol{i} \cdot \boldsymbol{C}_2 = \boldsymbol{C}_2 \cdot \boldsymbol{i} = \boldsymbol{\sigma}_{\mathrm{h}}$

A 6.1.22. $\boldsymbol{C}_2^2 = \mathbf{1}$, $\boldsymbol{i} \cdot \boldsymbol{\sigma}_{\mathrm{h}} = \boldsymbol{\sigma}_{\mathrm{h}} \cdot \boldsymbol{i} = \boldsymbol{C}_2$

A 6.1.23. $\boldsymbol{C}_2 \cdot \boldsymbol{\sigma}_{\mathrm{h}}$ ist nach 6.1.1. kein Symmetrieelement der Tetraedergruppe.

A 6.1.24. $\boldsymbol{C}_3$, $\boldsymbol{C}_3^2$, $\boldsymbol{\sigma}_{\mathrm{h}}$, $\boldsymbol{S}_3$, $\boldsymbol{\sigma}_{\mathrm{h}} \cdot \boldsymbol{C}_3^2$, $\mathbf{1}$

A 6.1.25. Gruppe $C_{3\mathrm{v}}$: $\boldsymbol{C}_3$, $\boldsymbol{C}_3^2$, $\boldsymbol{\sigma}_{\mathrm{v}}$, $\boldsymbol{\sigma}_{\mathrm{v}}'$, $\boldsymbol{\sigma}_{\mathrm{v}}''$, $\mathbf{1}$; $\boldsymbol{C}_3 \cdot \boldsymbol{\sigma}_{\mathrm{v}} = \boldsymbol{\sigma}_{\mathrm{v}} \cdot \boldsymbol{C}_3$

A 6.1.26. $\boldsymbol{C}_6$, $\boldsymbol{C}_3$, $\boldsymbol{C}_2$, $\boldsymbol{C}_3^{-1}$, $\boldsymbol{C}_6^{-1}$, $\boldsymbol{\sigma}_{\mathrm{v}}$, $\boldsymbol{\sigma}_{\mathrm{v}}'$, $\boldsymbol{\sigma}_{\mathrm{v}}''$, $\boldsymbol{\sigma}_{\mathrm{d}}$, $\boldsymbol{\sigma}_{\mathrm{d}}'$, $\boldsymbol{\sigma}_{\mathrm{d}}''$, $\mathbf{1}$; $\boldsymbol{C}_6 \cdot \boldsymbol{\sigma}_{\mathrm{d}} \neq \boldsymbol{\sigma}_{\mathrm{d}} \cdot \boldsymbol{C}_6$

A 6.1.27. $\boldsymbol{C}_5$, $\boldsymbol{C}_5^2$, $\boldsymbol{C}_5^3$, $\boldsymbol{C}_5^{-1}$, $\boldsymbol{C}_2$, $\boldsymbol{C}_2'$, $\boldsymbol{C}_2''$, $\boldsymbol{C}_2'''$, $\boldsymbol{C}_2^{\mathrm{IV}}$, $\mathbf{1}$

A 6.1.28. $D_n = [\boldsymbol{C}_n, \boldsymbol{C}_2]$ mit $n = 2$; drei $\boldsymbol{C}_2$-Drehungen um zueinander senkrechte Achsen; Vierergruppe nach A 6.1.11.

A 6.1.29. $n$ Drehungen $\boldsymbol{C}_n$, $\boldsymbol{C}_n^2$, ...; $n$ horizontale Drehung $\boldsymbol{C}_2$; $n$ vertikale Drehspiegelungen $\boldsymbol{S}_n$; $n$ vertikale Spiegelungen $\boldsymbol{\sigma}_{\mathrm{v}} = \boldsymbol{C}_2 \cdot \boldsymbol{\sigma}_{\mathrm{h}}$

A 6.1.30. $n$ Spiegelungen $\boldsymbol{\sigma}_{\mathrm{d}}$, ...; $n$ Drehungen $\boldsymbol{C}_n$, ...; $n$ Drehungen $\boldsymbol{C}_2$; $n$ Drehspiegelungen $\boldsymbol{S}_{2n}$, $\boldsymbol{S}_{2n}^2$, ...; $D_{n\mathrm{d}} = [\boldsymbol{S}_{2n}, \boldsymbol{\sigma}_{\mathrm{d}}]$

A 6.1.31. $C_{\infty\mathrm{v}}$

A 6.1.32. $D_{\infty\mathrm{h}}$

A 6.1.33. $\mathbf{1}$, $\boldsymbol{C}_3$, $\boldsymbol{C}_3^2$, $\boldsymbol{\sigma}_{\mathrm{v}}$, $\boldsymbol{\sigma}_{\mathrm{v}}'$, $\boldsymbol{\sigma}_{\mathrm{v}}''$; dazu drei Drehungen $\boldsymbol{C}_2$, drei Drehspiegelungen $\boldsymbol{S}_3$; $D_{3\mathrm{h}}$

A 6.1.34. $D_{3\mathrm{h}}$

A 6.1.35. $C_{4\mathrm{v}}$

A 6.1.36. $\boldsymbol{S}_4$; $\boldsymbol{C}_2$; zwei $\boldsymbol{C}_2$-Achsen senkrecht zu $\boldsymbol{S}_4$ durch je zwei H-Atome und die $\boldsymbol{S}_4$-Achse; $D_{2\mathrm{d}}$

A 6.2.1. $D = 562\ \mathrm{N\,m^{-1}}$

A 6.2.2. $m_1 = 2m_0$, $m_4 = m_0$; 784, 181, 2240 $\mathrm{N\,m^{-1}}$

A 6.2.3. $sp^{(3)}\boldsymbol{C}_6 = 2$, $sp^{(3)}\boldsymbol{C}_8 = 1 + \sqrt{2}$, $sp^{(3)}\boldsymbol{C}_{12} = 1 + \sqrt{3}$, $sp^{(3)}\boldsymbol{S}_3 = -2$,
$sp^{(3)}\boldsymbol{S}_4 = -1$, $sp^{(3)}\boldsymbol{S}_6 = 0$, $sp^{(3)}\boldsymbol{S}_8 = -1 + \sqrt{2}$, $sp^{(3)}\boldsymbol{S}_{12} = -1 + \sqrt{3}$

A 6.2.4. $sp\,\mathbf{1} = 9$, $sp\boldsymbol{C}_2 = -1$, $sp\boldsymbol{\sigma}_{\mathrm{v}} = 3$, $sp\boldsymbol{\sigma}_{\mathrm{v}}' = 1$

A 6.2.5. $\mathbf{1}$ (12), $\boldsymbol{\sigma}_{\mathrm{h}}$ (12), drei $\boldsymbol{\sigma}_{\mathrm{v}}$, drei $\boldsymbol{C}_2$ (je 4); $sp\boldsymbol{\sigma}_{\mathrm{h}} = 12$, $sp\boldsymbol{C}_2 = -4$, $sp\,\mathbf{1} = 36$, $sp\boldsymbol{\sigma}_{\mathrm{v}} = 4$

A 6.2.6. 54, 0, −2, 0, 2, 0, 18, 0

A 6.2.7. 48, 2, 0, 2, 2, 0, 18, 0

A 6.2.8. 3, −1, −1, −1, 1, −1, 1, −3

A 6.2.9. 2, 2 cos $\varphi$, −2, −2

A 6.2.10. $\mathbf{1}$, $\boldsymbol{C}_2$, $\boldsymbol{\sigma}_{\mathrm{v}}$, $\boldsymbol{\sigma}_{\mathrm{v}}' \cdot \boldsymbol{\sigma}_{\mathrm{v}}$ ist mit der Ebene der drei Atome O (Atom *1*, $\boldsymbol{b}_1$, $\boldsymbol{b}_2$, $\boldsymbol{b}_3$), H (Atom *2*, $\boldsymbol{b}_4$, $\boldsymbol{b}_5$, $\boldsymbol{b}_6$), H (Atom *3*, $\boldsymbol{b}_7$, $\boldsymbol{b}_8$, $\boldsymbol{b}_9$) identisch. $\boldsymbol{b}_1$, $\boldsymbol{b}_4$, $\boldsymbol{b}_7$ weisen in Richtung $\boldsymbol{C}_2$; $\boldsymbol{b}_3$, $\boldsymbol{b}_6$, $\boldsymbol{b}_9$ stehen senkrecht zu $\boldsymbol{\sigma}_{\mathrm{v}}$.

$$\mathbf{1}\boldsymbol{X} = \boldsymbol{X},$$

$$\boldsymbol{C}_2\boldsymbol{X} = x_1\boldsymbol{b}_1 - x_2\boldsymbol{b}_2 - x_3\boldsymbol{b}_3 + x_7\boldsymbol{b}_4 - x_8\boldsymbol{b}_5 - x_9\boldsymbol{b}_6 + x_4\boldsymbol{b}_7 - x_5\boldsymbol{b}_8 - x_6\boldsymbol{b}_9,$$

$$\boldsymbol{\sigma}_{\mathrm{v}}\boldsymbol{X} = x_1\boldsymbol{b}_1 - x_2\boldsymbol{b}_2 + x_3\boldsymbol{b}_3 + x_7\boldsymbol{b}_4 - x_8\boldsymbol{b}_5 + x_9\boldsymbol{b}_6 + x_4\boldsymbol{b}_7 - x_5\boldsymbol{b}_8 + x_6\boldsymbol{b}_9,$$

$$\boldsymbol{\sigma}_{\mathrm{v}}'\boldsymbol{X} = x_1\boldsymbol{b}_1 + x_2\boldsymbol{b}_2 - x_3\boldsymbol{b}_3 + x_4\boldsymbol{b}_4 + x_5\boldsymbol{b}_5 - x_6\boldsymbol{b}_6 + x_7\boldsymbol{b}_7 + x_8\boldsymbol{b}_8 - x_9\boldsymbol{b}_9$$

A 6.3.1. $\{\mathbf{1}\}, \{\boldsymbol{i}\}$

A 6.3.2. $\mathbf{1}, 8\boldsymbol{C}_3, 3\boldsymbol{C}_2, 6\boldsymbol{S}_4, 6\boldsymbol{\sigma}_d$

A 6.3.3. $\{a, b, \ldots\}$, $\{a, c, \ldots\}$ seien zwei verschiedene Klassen, die beide $a$ enthalten. Dann ist $a$ zu $b$ und zu $c$ konjugiert. Daher sind auch $b$ und $c$ konjugiert und bilden eine Klasse, ebenso wie alle anderen Elemente beider Klassen untereinander.

A 6.3.4. Aus $a^n = 1$ folgt $(\sigma \cdot a \cdot \sigma^{-1})^n = (\sigma \cdot a \cdot \sigma^{-1})(\sigma \cdot a \cdot \sigma^{-1})(\sigma \cdot a \cdot \sigma^{-1}) = (\sigma \cdot a \cdot a \times \sigma^{-1})(\sigma \cdot a \cdot \sigma^{-1}) \ldots = \sigma \cdot a^n \cdot \sigma^{-1} = \sigma \cdot \mathbf{1} \cdot \sigma^{-1} = \mathbf{1}$

A 6.3.5. $\chi(\sigma \cdot a \cdot \sigma^{-1}) = \chi(\sigma^{-1} \cdot \sigma \cdot a) = \chi(a)$

A 6.3.6. $\mathbf{1}, \boldsymbol{C}_3, \boldsymbol{C}_3{}^2; \boldsymbol{C}_2, \boldsymbol{C}_2', \boldsymbol{C}_2''; \boldsymbol{\sigma}_h; \boldsymbol{S}_3, \boldsymbol{S}_3{}^5; \boldsymbol{\sigma}_v, \boldsymbol{\sigma}_v', \boldsymbol{\sigma}_v''$

A 6.3.7. $K\{\sigma_1, \ldots, \sigma_k\}$
$\tau\sigma_1\tau^{-1}, \ldots, \tau\sigma_k\tau^{-1}$ sind voneinander verschiedene Elemente in $K$, da sonst aus $\tau\sigma_i\tau^{-1} = \tau\sigma_j\tau$ $\sigma_i = \sigma_j$ folgen würde. Daher folgt $\tau\varkappa\tau^{-1} = \varkappa$, $\tau\varkappa = \varkappa\tau$ für jedes Element $\tau$.

A 6.3.8. $\tau^{-1} \sum_j n_j\sigma_j = \sum_j n_j\sigma_j\tau^{-1}$,

$$\sum_j n_j\sigma_j = \sum_j n_j\tau\sigma_j\tau^{-1} = \sum_j n_i\sigma_i$$

$\tau\sigma_j\tau^{-1}$ und $\sigma_j$ durchlaufen dabei alle Elemente der Klasse. Aus Koeffizientenvergleich folgt $n_j = n_i$. Werden alle Elemente durchlaufen, ergibt sich Gleichheit von $n_j$ mit allen Elementen einer Klasse.

A 6.3.9. $2^n - 1$

A 6.3.10.
$$\boldsymbol{\pi}_1 = \frac{1}{4}(\mathbf{1} + \boldsymbol{C}_2 + \boldsymbol{i} + \sigma_h), \quad \boldsymbol{\pi}_2 = \frac{1}{4}(\mathbf{1} - \boldsymbol{C}_2 - \boldsymbol{i} - \boldsymbol{\sigma}_h),$$
$$\boldsymbol{\pi}_3 = \frac{1}{4}(\mathbf{1} + \boldsymbol{C}_2 - \boldsymbol{i} - \sigma_h), \quad \boldsymbol{\pi}_4 = \frac{1}{4}(\mathbf{1} - \boldsymbol{C}_2 - \boldsymbol{i} + \sigma_h)$$

A 6.3.11. Sei $\sum \boldsymbol{\pi}_i = \boldsymbol{\pi} \neq \mathbf{1}$, so wäre $\boldsymbol{\pi} - \mathbf{1}$ wegen $(\mathbf{1} - \boldsymbol{\pi})^2 = \mathbf{1} - 2\boldsymbol{\pi} + \boldsymbol{\pi}^2 = \mathbf{1} - \boldsymbol{\pi}$ idempotent; wegen $(\mathbf{1} - \boldsymbol{\pi})\,\boldsymbol{\pi}_j = \boldsymbol{\pi}_j - \sum_i \boldsymbol{\pi}_i\boldsymbol{\pi}_j = 0$ ist $\mathbf{1} - \boldsymbol{\pi}$ orthogonal zu allen $\boldsymbol{\pi}_i$, das System $\boldsymbol{\pi}_1, \ldots, \boldsymbol{\pi}_h$ daher nicht vollständig.

A 6.3.12. Sei $\boldsymbol{\pi}_i = \boldsymbol{\pi}_{i1} + \boldsymbol{\pi}_{i2}$. Aus der Orthogonalität folgt $\boldsymbol{\pi}_{i1} = \boldsymbol{\pi}_{i1} \cdot \boldsymbol{\pi}_i$, $\boldsymbol{\pi}_{i2} = \boldsymbol{\pi}_{i2} \cdot \boldsymbol{\pi}_i$; für $j \neq i$ folgt $\boldsymbol{\pi}_{i1} \cdot \boldsymbol{\pi}_j = \boldsymbol{\pi}_{i1} \cdot \boldsymbol{\pi}_i \cdot \boldsymbol{\pi}_j = 0$, $\boldsymbol{\pi}_{i2} \cdot \boldsymbol{\pi}_i \cdot \boldsymbol{\pi}_j = 0$. Das System ist daher entgegen der Annahme nicht vollständig, sondern $\boldsymbol{\pi}_i$ durch $\boldsymbol{\pi}_{i1}$ und $\boldsymbol{\pi}_{i2}$ zu ersetzen.

A 6.3.13. Mit $\boldsymbol{\pi} \cdot \boldsymbol{\pi}_i \neq \boldsymbol{\pi}_i$ und $\boldsymbol{\pi} \cdot \boldsymbol{\pi}_i \neq 0$ ergeben sich mit $\boldsymbol{\pi} \cdot \boldsymbol{\pi}_i$, $\boldsymbol{\pi}_i \cdot \boldsymbol{\pi} \cdot \boldsymbol{\pi}_i$ zwei zueinander orthogonale Idempotente entgegen A 6.3.12.

A 6.3.14. Aus $\sum_j a_j\boldsymbol{\pi}_j = 0$ und $\boldsymbol{\pi}_i \cdot \boldsymbol{\pi}_j = 0$ folgt $a_i = 0$.

A 6.3.15. $\boldsymbol{\pi}'_{ij}$ des zweiten Systems ist durch das erste System darstellbar. Wegen Unzerlegbarkeit müßte $\boldsymbol{\pi}'_{ij}$ mit einem Element aus dem ersten System identisch sein.

A 6.3.16. $A_g$ 9, $B_{1g}$ 9, $B_{2g}$ 4, $B_{3g}$ 5, $A_u$ 4, $B_{1u}$ 5, $B_{2u}$ 9, $B_{3u}$ 9

A 6.3.17. $B_{1u}$, $B_{2u}$, $B_{3u}$ je eine

A 6.3.18. $B_{1g}$, $B_{2g}$, $B_{3g}$

A 6.3.19. $U_1$: $\boldsymbol{b}_4 + \boldsymbol{b}_7, \boldsymbol{b}_5 - \boldsymbol{b}_8, \boldsymbol{b}_1$; $U_2$: $\boldsymbol{b}_6 - \boldsymbol{b}_9$; $U_3$: $\boldsymbol{b}_4 - \boldsymbol{b}_7, \boldsymbol{b}_5 + \boldsymbol{b}_8, \boldsymbol{b}_2$; $U_4$: $\boldsymbol{b}_6 + \boldsymbol{b}_9, \boldsymbol{b}_3$

A 6.3.20. Aus der Charaktertafel des Basissystems der orthogonalen Idempotente des Zentrums für die Gruppe $C_{2h}$ folgt: $U_1$: symmetrisch $\mathbf{1}, \boldsymbol{C}_2, \boldsymbol{\sigma}_v, \boldsymbol{\sigma}_v'$; $U_2$: symmetrisch $\mathbf{1}$,

$C_2$, antimetrisch $\sigma_v$, $\sigma_v'$; $U_3$: symmetrisch **1**, $\sigma_v$, antimetrisch $C_2$, $\sigma_v'$; $U_4$: symmetrisch **1**, $\sigma_v$, antimetrisch $C_2$, $\sigma_v$.

A 6.3.21. $\chi(C_3) = 3 \cdot 1 + 1 \cdot 1 + 4 \cdot (-1) = 0$, $\chi'(C_3) = 2 \cdot 1 + 2 \cdot (-2) = 0$

A 6.3.22. Aus der Definition der $\pi_i$ und aus $\pi_i \cdot \pi_j = 0$ folgt durch Vergleich der Summanden für **1** die Orthogonalität, in gleicher Weise aus $\pi_i^2 = 1$ die Normierung.

A 6.3.23. Für zwei Vektoren $X$ und $Y$ des $i$-ten Symmetrietyps gilt $\pi_i(X + Y) = X + Y$, $\pi_i(aX) = aX$.
Daher sind $X + Y$ und $aX$ ebenfalls Vektoren des $i$-ten Symmetrietyps, und die Gesamtheit dieser Vektoren bildet einen Unterraum $U_i$. Für $\sigma$ aus $G$, $X$ aus $U_i$ gilt $\pi_i(\sigma X) = \sigma X$; $U_i$ ist daher $G$-invarianter Unterraum.

A 6.3.24. $\pi_i(\pi_i X) = \pi_i X_i$, $\pi_i X = \sum_j x_j \pi_i b_j$. Sämtliche Vektoren $\pi_i b_j$ liegen in $U_i$.

A 6.3.25. $X = 1 \cdot X = \sum \pi_i X$, $\pi_i X = X_i$; $X_i = \pi_i X_i$, $\pi_i X_j = \pi_i \pi_j X_j = 0$ für $i \neq j$. Daher ist $\pi_i X = \pi_i(X_1 + \ldots + X_h) = X_i$, d. h., $X_i = \pi_i X$ ist eindeutig bestimmt.

A 7.1.1. $m - m_0 = \frac{h}{c} \frac{\lambda_C}{\lambda_0(\lambda_0 + \lambda_C)}$

A 7.1.2. $\frac{m - m_0}{m_0} = 0{,}047$, $v = 0{,}30c$

A 7.1.3. $S_0 = 4{,}7 \cdot 10^{16}\ \mathrm{W\ m^{-2}}$

A 7.1.4. $\dot{W} = 2{,}7 \cdot 10^{-7}\ \mathrm{W}$

A 7.1.5. $\dot{W} = 1{,}0 \cdot 10^{-18}\ \mathrm{W}$

A 7.2.1. $B = 27{,}79\ \mathrm{cm^{-1}}$, $14{,}50\ \mathrm{cm^{-1}}$, $9{,}29\ \mathrm{cm^{-1}}$

A 7.2.2. $I = 2{,}65 \cdot 10^{-47}\ \mathrm{kg\ m^2}$, $r = 1{,}27 \cdot 10^{-10}\ \mathrm{m}$

A 7.2.3. $f_{osz} = 7{,}95 \cdot 10^{13}\ \mathrm{Hz}$, $I = 3{,}31 \cdot 10^{-47}\ \mathrm{kg\ m^2}$, $r = 1{,}41 \cdot 10^{-10}\ \mathrm{m}$

A 7.2.4. $f_{osz} = 6{,}5076 \cdot 10^{13}\ \mathrm{Hz}$, $I = 1{,}47 \cdot 10^{-46}\ \mathrm{kg\ m^2}$, $r = 1{,}13 \cdot 10^{-10}\ \mathrm{m}$

A 7.2.5. $\Delta \frac{1}{\lambda} = 3{,}8\ \mathrm{cm^{-1}}$

A 7.2.6. $\hbar\omega_0 = 4{,}31 \cdot 10^{-20}\ \mathrm{J}$, $\frac{\hbar^2}{2I} = 3{,}7 \cdot 10^{-23}\ \mathrm{J}$

A 7.2.7. Zweiatomige Moleküle müssen ein permanentes elektrisches Dipolmoment besitzen. Das ist nur für Moleküle aus zwei verschiedenen Atomen möglich.

A 7.2.8. $I = 4{,}31 \cdot 10^{-47}\ \mathrm{kg\ m^2}$, $I' = 4{,}39 \cdot 10^{-47}\ \mathrm{kg\ m^2}$

A 7.2.9. $I = 4{,}55 \cdot 10^{-47}\ \mathrm{kg\ m^2}$, $I' = 5{,}54 \cdot 10^{-47}\ \mathrm{kg\ m^2}$

A 7.2.10. $r = 0{,}077\ \mathrm{nm}$

A 7.3.1.

| | $A_1$ | $A_2$ | $B_1$ | $B_2$ |
|---|---|---|---|---|
| $A_1$ | $A_1$ | $A_2$ | $B_1$ | $B_2$ |
| $A_2$ | $A_2$ | $A_1$ | $B_2$ | $B_1$ |
| $B_1$ | $B_1$ | $B_2$ | $A_1$ | $A_2$ |
| $B_2$ | $B_2$ | $B_1$ | $A_2$ | $A_1$ |

A 7.3.2. $B_1 \to A_1(E_x)$, $B_2 \to A_1(E_y)$, $A_1 \to A_1(E_z)$

A 7.3.3. $A'' \to A'$

A 7.3.4. $B_2 \to A_2(E_x)$, $B_1 \to A_2(E_y)$, $A_2 \to A_2(E_z)$

A 7.3.5. $A_u \to B_{1g}$

A 7.3.6.

| | $A_1$ | $A_2$ | $B_1$ | $B_2$ | $E_1$ | $E_2$ | $E_3$ |
|---|---|---|---|---|---|---|---|
| $A_1$ | $A_1$ | $A_2$ | $B_1$ | $B_2$ | $E_1$ | $E_2$ | $E_3$ |
| $A_2$ | $A_2$ | $A_1$ | $B_2$ | $B_1$ | $E_1$ | $E_2$ | $E_3$ |
| $B_1$ | $B_1$ | $B_2$ | $A_1$ | $A_2$ | $E_3$ | $E_2$ | $E_1$ |
| $B_2$ | $E_1$ | $E_1$ | $E_3$ | $E_3$ | $E_3$ | $E_2$ | $E_1$ |
| $E_1$ | $E_1$ | $E_1$ | $E_3$ | $E_3$ | $A_1 + A_2 + E_2$ | $E_1 + E_3$ | $B_1 + B_2 + E_2$ |
| $E_2$ | $E_2$ | $E_2$ | $E_2$ | $E_2$ | $E_1 + E_3$ | $A_1 + A_2 + B_1 + B_2$ | $E_1 + E_3$ |
| $E_3$ | $E_3$ | $E_3$ | $E_1$ | $E_1$ | $B_1 + B_2 + E_2$ | $E_1 + E_3$ | $A_1 + A_2 + E_2$ |

A 7.3.7. $A_1 \to E_1(E_x, E_y)$, $A_1 \to B_2(E_z)$

A 7.3.8. $A_2 \to E_1$, $B_1 \to E_3$, $B_2 \to E_3$, $E_1 \to E_2$, $E_1 \to A_2$, $E_2 \to E_3(E_x, E_y)$;

$A_2 \to B_1$, $B_1 \to A_2$, $E_1 \to E_3$, $E_2 \to E_2(E_z)$

A 7.3.9. Vorzeichenumkehr

A 7.3.10. Symmetrierasse $E$ gemeinsam mit $\alpha_{yz}$:

$\alpha_{\hat{x}\hat{z}} = \cos\varphi\alpha_{xz} + \sin\varphi\alpha_{yz}$,

$\alpha_{\hat{y}\hat{z}} = -\sin\varphi\alpha_{xz} + \cos\varphi\alpha_{yz}$

A 7.3.11. $A_1$: 2, $A_2$: 0, $B_1$: 1, $B_2$: 0 für IR- und RAMAN-Linien

A 7.3.12. Für $D_{3h}$ wäre nur eine IR-Linie in der Rasse $E'$ möglich. Ozon bildet daher ein gleichschenkliges Dreieck ($C_{2v}$).

A 7.3.13. $\hat{\boldsymbol{m}} = \boldsymbol{\sigma m}$, $\chi_m = sp\sigma = 2\cos\varphi \pm 1$,

$$n_{\boldsymbol{m}}(\pi_k) = \frac{g}{h} \sum_j \varrho_j \chi(\sigma_{jk}^{-1})\, \chi_{\boldsymbol{m}} = n_T$$

Für $n_T > 0$ ist die IR-Linie erlaubt, für $n_T = 0$ verboten. IR-Linien treten daher nur für Symmetrierassen auf, die Translationen enthalten.

A 7.3.14. $\chi_\alpha = 2\cos\varphi\,(\pm 1 + 2\cos\varphi)$; 0, 2, 2, 6, 0, 0

A 7.3.15. $n_\alpha(\pi_k) = \frac{g}{h} \sum_j \varrho_j \chi(\sigma_{jk}^{-1})\, \chi_\alpha$;

$n_\alpha(\pi_k) > 0$: RAMAN-Linien treten auf,
$n_\alpha(\pi_k) = 0$: RAMAN-Linien verboten.

A 7.3.16. $A_g$, $B_{1g}$, $B_{2g}$, $B_{3g}$

A 8.1.1. $\Delta \frac{1}{\lambda} = \frac{\Delta f}{c} = 0{,}016\ \mathrm{m}^{-1}$, $\Delta\lambda = 3{,}4 \cdot 10^{-14}$ m

A 8.1.2. $T = 8{,}3 \cdot 10^{16}$ K

A 8.1.3. $f_{10\mathrm{dB}} = f_0 \pm \frac{3}{2}\Delta f$, $(\Delta f)_{10\mathrm{dB}} = 3\,\Delta f = 3 \cdot 10^9$ Hz

A 8.1.4. $\Delta f = (\Delta f)_{3\mathrm{dB}}, \quad f_{3\mathrm{dB}} = f_0 \pm \frac{\Delta f}{2}$

A 8.1.5. $B_f = 1{,}1 \cdot 10^{-12}\ \mathrm{s^{-1}\ m^3}$

A 8.1.6. $f = f_0 \pm \frac{\Delta f}{2} \sqrt{\frac{60 - 10}{10}}, \quad \mathrm{d}\lambda = \frac{\lambda^2\, \mathrm{d}f}{c},$

$\lambda = (632{,}8 \pm 0{,}00015)\ \mathrm{nm}$

A 8.1.7. $g(f) = \frac{2}{\Delta f} \sqrt{\frac{\ln 2}{\pi}}\ \mathrm{e}^{-\left[\frac{2(f-f_0)}{\Delta f}\sqrt{\ln 2}\right]^2}$

A 8.1.8. $\Delta f_{\mathrm{G}} = 3{,}6\ \mathrm{GHz}$

A 8.1.9. $B_f = 4{,}5 \cdot 10^{-10}\ \mathrm{m^3\ s^{-1}}$, $\tau = 338\ \mathrm{nm}$,

$B_{12} = 2{,}6 \cdot 10^{20}\ \mathrm{J^{-1}\ s^{-2}\ m^3}$

A 8.2.1. $\delta f = \frac{c}{2L}, \quad \delta f = 7{,}5 \cdot 10^8\ \mathrm{Hz},\ \delta\lambda = 0{,}9 \cdot 10^{-12}\ \mathrm{m}$

A 8.2.2. $\Delta\lambda = 1{,}15 \cdot 10^{-14}\ \mathrm{m}$

A 8.2.3. $\delta_W = \frac{4\pi^2}{3} \frac{a^2\beta^2}{\lambda^2}$

A 8.2.4. $\delta_W = 0{,}0017$

A 8.2.5. $Q = 2{,}0 \cdot 10^{10}$, $T = 1{,}1 \cdot 10^{-5}\ \mathrm{s}$

A 8.2.6. $NV = 6{,}7 \cdot 10^{16}$

A 8.2.7. $n_{\mathrm{p}} = 9{,}4 \cdot 10^{22}\ \mathrm{m^{-3}}$

A 8.2.8. $n_{\mathrm{p}} \geqq 1{,}3 \cdot 10^{18}\ \mathrm{m^{-3}}$

A 8.2.9. $\dot{W}_{\mathrm{p}} = 1{,}25\ \mathrm{kW}, \quad \frac{\dot{W}_{\mathrm{A}}}{\dot{W}_{\mathrm{p}}} = 0{,}016$

A 8.2.10. $V = 2{,}6\ \mathrm{cm^3}$, $\dot{W}_{\mathrm{p}} = 1{,}4\ \mathrm{kW}$

A 8.2.11. $n_{\mathrm{p}} > 4{,}6 \cdot 10^{12}\ \mathrm{m^{-3}}$

A 8.2.12. $R_2 = 1{,}5 \cdot 10^{22}\ \mathrm{m^{-3}\ s^{-1}}$

A 8.2.13. $R_2 > 5 \cdot 10^{24}\ \mathrm{m^{-3}\ s^{-1}}, \quad R_2 V > 5 \cdot 10^{19}\ \mathrm{s^{-1}}$

A 8.2.14. $\hat{n}_{\mathrm{p}} < \frac{0{,}01\, \dot{W}}{hfV} = 1{,}7 \cdot 10^{22}\ \mathrm{m^{-3}}$

A 8.2.15. $1 - \frac{n_{\mathrm{p}\infty}}{n_{\mathrm{p}0}} = 0{,}25$, $\Delta t = 318\ \mathrm{ns}$, $N_{\mathrm{M}} = 4{,}4 \cdot 10^{21}\ \mathrm{m^{-3}}$

A 8.3.1. $T_{\mathrm{A}} \sim \boldsymbol{A}\boldsymbol{A}^* = \frac{A_{\mathrm{S}}^2}{r^2} + A_{\mathrm{R}}^2 + \frac{A_{\mathrm{S}}A_{\mathrm{R}}}{r}\ \mathrm{e}^{\mathrm{i}kr} + \frac{A_{\mathrm{S}}A_{\mathrm{R}}}{r}\ \mathrm{e}^{-\mathrm{i}kr};$

$T_{\mathrm{A}}\boldsymbol{A}_{\mathrm{C}} \sim \frac{A_{\mathrm{S}}^2}{r^2} + A_{\mathrm{R}}^2 + A_{\mathrm{R}}^2 \frac{A_{\mathrm{S}}\, \mathrm{e}^{\mathrm{i}kr}}{r} + A_{\mathrm{R}}^2 \frac{A_{\mathrm{S}}}{r}\ \mathrm{e}^{-\mathrm{i}kr}$

Die ersten beiden Summanden sind Störglieder, der dritte liefert als auslaufende Kugelwelle den virtuellen, der vierte als einlaufende Kugelwelle den reellen Bildpunkt.

A 8.3.2. $$\frac{A_S\,e^{ikr}}{r}\,T_A \sim \left(\frac{A_S^2}{r^2}+A_R^2\right)A_S\,e^{ikr}+A_R^*\,\frac{A_S^2}{r^2}\,e^{2ikr}+\frac{A_S^2}{r^2}\,A_R$$

Die Referenzwelle liefert nach A 8.3.1. als Rekonstruktionswelle die Signalwelle, die Signalwelle die Referenzwelle.

A 8.3.3. $$\frac{A_S\,e^{-ikr}}{r}\,T_A \sim \left(\frac{A_S^2}{r^2}+A_R^2\right)\frac{A_S\,e^{-ikr}}{r}+\frac{A_S^2A_R^*}{r^2}+\frac{A_S^2}{r^2}\,e^{-2ikr}\,A_R$$

A 8.3.4. $z_{B'} = z_0$, $z_B = -z_0$; der virtuelle Bildpunkt fällt mit dem Objektpunkt zusammen. Der reelle Bildpunkt liegt bezüglich der Hologrammebene spiegelbildlich dazu.

A 8.3.5. $\boldsymbol{k}$ liegt für die Referenzwelle in der $x, y$-Ebene. Die Referenzwelle erzeugt das Wellenfeld

$$\left(\frac{A_S^2}{r^2}+A_R^2\right)A_R\,e^{ikz\cos\vartheta}+\frac{A_S}{r}\,A_R^2\,e^{ik(r-x\sin\vartheta+z\cos\vartheta)}+\frac{A_S}{r}\,A_R^2\,e^{-ik(r-x\sin\vartheta-z\cos\vartheta)}$$

Virtueller und reeller Bildpunkt entstehen in der $x, y$-Ebene in den Richtungen, die mit der $x$-Achse die Winkel $\vartheta$ bzw. $-\vartheta$ bilden.

A 8.3.6. $$z_C = -\infty,\quad V_{\mathrm{lat\,r}} = \frac{m}{1-\dfrac{z_0}{z_R}}$$

Durch Wahl von $\lambda_C > \lambda_0$ ist daher bei festem $m$ eine laterale Vergrößerung nur durch sphärische Wellenfronten möglich. Für die longitudinale Vergrößerung folgt

$$V_{\mathrm{long\,r}} = -\frac{\lambda_0}{\lambda_C}\,\frac{m^2}{1-\dfrac{z_0}{z_R}}$$

A 8.3.7. $z_C = \infty$, $z_L = -80$ cm, $z_L = 1{,}33$ m

A 8.3.8. $x_v = 1{,}1$ cm, $z_v = -24{,}5$ cm, $x_r = -1{,}3$ cm, $z_r = 29{,}3$ cm

A 8.3.9. $\lambda_C = 4533$ nm, infrarot

# Tabellen

**Tab. 1.1.1. Relative spektrale Hellempfindlichkeit**

| $\lambda$ nm | $K(\lambda)$ | $\lambda$ nm | $K(\lambda)$ | $\lambda$ nm | $K(\lambda)$ |
|---|---|---|---|---|---|
| 400 | 0,0004 | 530 | 0,862 | 600 | 0,631 |
| 450 | 0,038 | 540 | 0,954 | 620 | 0,381 |
| 470 | 0,091 | 550 | 0,995 | 640 | 0,175 |
| 480 | 0,139 | 555 | 1,000 | 660 | 0,061 |
| 490 | 0,208 | 560 | 0,995 | 680 | 0,017 |
| 500 | 0,323 | 570 | 0,952 | 700 | 0,0041 |
| 510 | 0,503 | 580 | 0,870 | 750 | 0,00012 |
| 520 | 0,710 | 590 | 0,757 | 760 | 0,00006 |

**Tab. 1.1.2. Erforderliche Beleuchtungsstärken**

| Kennzeichnung | $E$ in lx |
|---|---|
| Arbeit höchster Präzision | 4000 |
| gröbere Arbeiten | 250 |
| Verkehrsknotenpunkte | 25 |
| Wohnstraßen | 5 |
| minimale Beleuchtung | 1 |

**Tab. 3.2.1. Brechzahlen einachsiger Kristalle bei 18°C**

| Kristall | $\lambda_0$ in nm | $n_0$ | $n_e$ |
|---|---|---|---|
| Quarz $SiO_2$ | 486 | 1,5497 | 1,5590 |
| | 589 | 1,5442 | 1,5533 |
| | 656 | 1,5419 | 1,5509 |
| Kalkspat $CaCO_3$ | 486 | 1,6678 | 1,4907 |
| | 589 | 1,6584 | 1,4864 |
| | 656 | 1,6544 | 1,4846 |

**Tab. 3.3.1. Verdetsche Konstante und Absorptionskoeffizient**

| Stoff | $V$ in rad $A^{-1}$ | $\beta$ in $m^{-1}$ | $\lambda_0$ in nm | $T$ in K |
|---|---|---|---|---|
| TbAlSi—Glas | $7{,}9 \cdot 10^{-5}$ | 0,15 | 964 | 293 |
| $EuF_2$ | $2 \cdot 10^{-3}$ | 1250 | 450 | 293 |
| | $1 \cdot 10^{-3}$ | 300 | 480 | 293 |
| EuSe | $3{,}5 \cdot 10^{-3}$ | $5 \cdot 10^5$ | 670 | 293 |
| | | 4500 | 755 | 4,2 |
| Wasser | $4{,}8 \cdot 10^{-6}$ | | 589 | 273 |
| $CS_2$ | $1{,}6 \cdot 10^{-5}$ | | 589 | 273 |

**Tab. 3.3.2. Magnetooptische Eigenschaften bei Sättigungsmagnetisierung**

| Stoff | $\lambda_0$ in nm | $T$ in K | $F$ in $10^5$ K $m^{-1}$ | $\beta$ in $10^5$ $m^{-1}$ |
|---|---|---|---|---|
| Fe | 546 | 300 | 350 | 380 |
| Ni | 400 | 300 | 720 | 105 |
| MnBi | 630 | 300 | 140 | 170 |
| $Gd_3Fe_5O_{12}$ | 520 | 300 | 4 | 1,5 |
| EuO | 1280 | 60 | 200 | 0,05 |
| EuS | 660 | 4,2 | 260 | 0,085 |

**Tab. 3.3.3. Spezifisches Drehvermögen $\tilde{\alpha}$ optisch aktiver Medien**

| | $\tilde{\alpha}$ |
|---|---|
| Codein in Alkohol | 137,8 |
| Morphin in Methanol | −130,9 |
| d-Campher in Alkohol | 44,26 |
| n-Fructose in Wasser | −92 |

**Tab. 3.3.4. Cotton-Mouton-Konstante $C$**

| Stoff | $T$ in °C | $\lambda_0$ in nm | $C$ in $10^{-13}$ $A^{-2}$ m |
|---|---|---|---|
| Azeton | 20,2 | 578 | 37,6 |
| Benzol | 26,5 | 578 | 7,5 |
| Chloroform | 17,2 | 578 | −65,8 |
| Nitrobenzol | 16,3 | 578 | 23,5 |
| Schwefel-kohlenstoff | 28,0 | 578 | −4,0 |

**Tab. 4.1.1. Größenordnung der Kohäranzlänge $\Delta l$**

| Lichtquelle | $\Delta l$ in m |
|---|---|
| Sonnenlicht | $10^{-6}$ |
| Spektrallampe | 0,01 |
| Rubinlaser, CO-Laser | 0,1 ... 1 |
| $Ar^+$-Laser | ≈1 |
| He-Ne-Laser als stabilisierter Einmoden-laser, praktisch je nach Betriebsdaten | 0,5 ... 100 |
| optimal | $10^6$ ... |

**Tab. 5.2.1. Anomale Zeeman-Aufspaltung der Terme eines Einelektronensystems**

| Term | $l$ | $j$ | $g$ | $mg_J$ für $m =$ | | | | | | | |
|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|
| | | | | −7/2 | −5/2 | −3/2 | −1/2 | 1/2 | 3/2 | 5/2 | 7/2 |
| $^2s_{1/2}$ | 0 | 1/2 | 2 | | | | −1 | 1 | | | |
| $^2p_{1/2}$ | 1 | 1/2 | 2/3 | | | | −1/3 | 1/3 | | | |
| $^2p_{3/2}$ | 1 | 3/2 | 4/3 | | | −2 | −2/3 | 2/3 | 2 | | |
| $^2d_{3/2}$ | 2 | 3/2 | 4/5 | | | −6/5 | −2/5 | 2/5 | 6/5 | | |
| $^2d_{5/2}$ | 2 | 5/2 | 6/5 | | −3 | −9/5 | −3/5 | 3/5 | 9/5 | 3 | |
| $^2f_{5/2}$ | 3 | 5/2 | 6/7 | | −15/7 | −9/7 | −3/7 | 3/7 | 9/7 | 15/7 | |
| $^2f_{7/2}$ | 3 | 7/2 | 8/7 | −4 | −20/7 | −12/7 | −4/7 | 4/7 | 12/7 | 20/7 | 4 |

**Tab. 5.2.2. Anomale Zeeman-Aufspaltung der Terme eines Zweielektronensystems**

| Parazustände $S = 0$ | | | | $M_J g_J$ für $M_J =$ | | | | | | |
|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|
| Term | $L$ | $J$ | $g_L$ | −3 | −2 | −1 | 0 | 1 | 2 | 3 |
| $^1S_0$ | 0 | 0 | 0/0 | | | | 0 | | | |
| $^1P_1$ | 1 | 1 | 1 | | | −1 | 0 | 1 | | |
| $^1D_2$ | 2 | 2 | 1 | | −2 | −1 | 0 | 1 | 2 | |
| $^1F_3$ | 3 | 3 | 1 | −3 | −2 | −1 | 0 | 1 | 2 | 3 |

**Tab. 5.2.2.** (Fortsetzung)

| Orthozustände $S = 1$ | | | | $M_J g_J$ für $M_J =$ | | | | | | |
|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|
| Term | $L$ | $J$ | $g_L$ | $-3$ | $-2$ | $-1$ | $0$ | $1$ | $2$ | $3$ |
| $^3S_1$ | 0 | 1 | 2 | | | $-2$ | 0 | 2 | | |
| $^3P_0$ | 1 | 0 | 0/0 | | | | 0 | | | |
| $^3P_1$ | 1 | 1 | 3/2 | | | $-3/2$ | 0 | 3/2 | | |
| $^3P_2$ | 1 | 2 | 3/2 | | $-3$ | $-3/2$ | 0 | 3/2 | 3 | |
| $^3D_1$ | 2 | 1 | 1/2 | | | $-1/2$ | 0 | 1/2 | | |
| $^3D_2$ | 2 | 2 | 7/6 | | $-7/3$ | $-7/6$ | 0 | 7/6 | 7/3 | |
| $^3D_3$ | 2 | 3 | 4/3 | $-4$ | $-8/3$ | $-4/3$ | 0 | 4/3 | 8/3 | 4 |

**Tab. 5.2.3. Werte für $M_e g_e - M_a g_a$ für die D-Linien des Natriumatoms**

| | $M_e g_e - M_a g_a$ bzw. $M_J(g_e - g_a)$ | | | |
|---|---|---|---|---|
| $D_1$ | | | | |
| $\pi$ | $-1 + \frac{1}{3} = -\frac{2}{3}$ | $1 - \frac{1}{3} = \frac{2}{3}$ | | |
| $\sigma$ | $-1 - \frac{1}{3} = -\frac{4}{3}$ | $1 + \frac{1}{3} = \frac{4}{3}$ | | |
| $D_2$ | | | | |
| $\pi$ | $-1 + \frac{2}{3} = -\frac{1}{3}$ | $1 - \frac{2}{3} = \frac{1}{3}$ | | |
| $\sigma$ | $-1 + 2 = 1$ | $-1 - \frac{2}{3} = -\frac{5}{3}$ | $1 + \frac{2}{3} = \frac{5}{3}$ | $1 - 2 = -1$ |

**Tab. 5.2.4. Paschen-Back-Aufspaltung der Terme eines Einelektronensystems**

| Term | $L = l$ | $M_S = s$ | $\Delta W/\mu_B B = M_L + 2M_S$ für $M_L =$ $-3$ | $-2$ | $-1$ | $0$ | $1$ | $2$ | $3$ |
|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|
| s | 0 | $-1/2$ | | | | $-1$ | | | |
| | | $1/2$ | | | | 1 | | | |
| p | 1 | $-1/2$ | | | $-2$ | $-1$ | 0 | | |
| | | $1/2$ | | | 0 | 1 | 2 | | |
| d | 2 | $-1/2$ | | $-3$ | $-2$ | $-1$ | 0 | 1 | |
| | | $1/2$ | | $-1$ | 0 | 1 | 2 | 3 | |
| f | 3 | $-1/2$ | $-4$ | $-3$ | $-2$ | $-1$ | 0 | 1 | 2 |
| | | $1/2$ | $-2$ | $-1$ | 0 | 1 | 2 | 3 | 4 |

**Tab. 5.2.5. Paschen-Back-Aufspaltung der Terme eines Zweielektronensystems**

| Term | $L$ | $M_S$ | $\Delta W/\mu_B B = M_L + 2M_S$ für $M_L =$ -3 | -2 | -1 | 0 | 1 | 2 | 3 |
|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|
| S | 0 | −1 | | | | −2 | | | |
| | | 0 | | | | 0 | | | |
| | | 1 | | | | 2 | | | |
| P | 1 | −1 | | | −3 | −2 | −1 | | |
| | | 0 | | | −1 | 0 | 1 | | |
| | | 1 | | | 1 | 2 | 3 | | |
| D | 2 | −1 | | −4 | −3 | −2 | −1 | 0 | |
| | | 0 | | −2 | −1 | 0 | 1 | 2 | |
| | | 1 | | 0 | 1 | 2 | 3 | 4 | |
| F | 3 | −1 | −5 | −4 | −3 | −2 | −1 | 0 | 1 |
| | | 0 | −3 | −2 | −1 | 0 | 1 | 2 | 3 |
| | | 1 | −1 | 0 | 1 | 2 | 3 | 4 | 5 |

**Tab. 5.2.6. Ordnungszahl $Z$, Anzahl der Neutronen $N$ im Kern, Massenzahl $M = N + Z$, Kernspinquantenzahl $I$, Kern-$g$-Faktor $g_I$**

| Kern | $Z$ | $N$ | $M$ | $I$ | $g_I$ |
|---|---|---|---|---|---|
| H | 1 | 0 | 1 | 1/2 | 2,78 |
| D | 1 | 1 | 2 | 1 | 0,85 |
| Li | 3 | 3 | 6 | 1 | 0,82 |
| Li | 3 | 4 | 7 | 3/2 | 3,25 |
| Na | 11 | 12 | 23 | 3/2 | 2,216 |
| Cl | 17 | 18 | 35 | 5/2 | 1,36 |
| Cl | 17 | 20 | 37 | 5/2 | 1,13 |
| K | 19 | 20 | 39 | 3/2 | 0,39 |
| K | 19 | 22 | 41 | 3/2 | 0,22 |
| Cu | 29 | 34 | 63 | 3/2 | 2,5 |
| Cu | 29 | 36 | 65 | 3/2 | 2,6 |

Für $Z$ gerade, $N$ gerade ist $I = 0$, $m_I = 0$

**Tab. 6.1.1. Gruppentafel der Symmetrieoperationen des $NH_3$-Moleküls**

| | 1 (1) | $C_3$ (1 2 3) | $C_3^2$ (1 3 2) | $\sigma_v$ (2 3) | $\sigma_v'$ (1 3) | $\sigma_v''$ (1 2) |
|---|---|---|---|---|---|---|
| 1 | 1 | $C_3$ | $C_3^2$ | $\sigma_v$ | $\sigma_v'$ | $\sigma_v''$ |
| $C_3$ | $C_3$ | $C_3^2$ | 1 | $\sigma_v''$ | $\sigma_v$ | $\sigma_v'$ |
| $C_3^2$ | $C_3^2$ | 1 | $C^3$ | $\sigma_v'$ | $\sigma_v''$ | $\sigma_v$ |
| $\sigma_v$ | $\sigma_v$ | $\sigma_v'$ | $\sigma_v''$ | 1 | $C_3$ | $C_3^2$ |
| $\sigma_v'$ | $\sigma_v'$ | $\sigma_v''$ | $\sigma_v$ | $C_3^2$ | 1 | $C_3$ |
| $\sigma_v''$ | $\sigma_v''$ | $\sigma_v$ | $\sigma_v'$ | $C_3$ | $C_3^2$ | 1 |

**Tab. 6.1.2. Gruppentafel der zyklischen Symmetrie des regelmäßigen Sechsecks**

| | $1$ | $C_6$ | $C_6^2$ | $C_6^3$ | $C_6^4$ | $C_6^{-1}$ |
|---|---|---|---|---|---|---|
| $1$ | $1$ | $C_6$ | $C_6^2$ | $C_6^3$ | $C_6^4$ | $C_6^{-1}$ |
| $C_6$ | $C_6$ | $C_6^2$ | $C_6^3$ | $C_6^4$ | $C_6^{-1}$ | $1$ |
| $C_6^2$ | $C_6^2$ | $C_6^3$ | $C_6^4$ | $C_6^{-1}$ | $1$ | $C_6$ |
| $C_6^3$ | $C_6^3$ | $C_6^4$ | $C_6^{-1}$ | $1$ | $C_6$ | $C_6^2$ |
| $C_6^4$ | $C_6^4$ | $C_6^{-1}$ | $1$ | $C_6$ | $C_6^2$ | $C_6^3$ |
| $C_6^{-1}$ | $C_6^{-1}$ | $1$ | $C_6$ | $C_6^2$ | $C_6^3$ | $C_6^4$ |

**Tab. 6.3.1. Charaktertafeln**

Gruppen $C_s$ und $C_n$

| $C_s$ | $1$ | $\sigma_h$ | | |
|---|---|---|---|---|
| $A'$ | $1$ | $1$ | $T_x, T_y; R_z$ | $\alpha_{xx}, \alpha_{yy}, \alpha_{zz}, \alpha_{xy}$ |
| $A''$ | $1$ | $-1$ | $T_z; R_x, R_y$ | $\alpha_{yz}, \alpha_{xz}$ |

| $C_2$ | $1$ | $C_2$ | | |
|---|---|---|---|---|
| $A$ | $1$ | $1$ | $T_z; R_z$ | $\alpha_{xx}, \alpha_{yy}, \alpha_{zz}, \alpha_{xy}$ |
| $B$ | $1$ | $-1$ | $T_x, T_y; R_x, R_y$ | $\alpha_{yz}, \alpha_{xz}$ |

| $C_3$ | $1$ | $C_3$ | $C_3^2$ | | $\varepsilon = e^{\frac{2\pi i}{3}}$ |
|---|---|---|---|---|---|
| $A$ | $1$ | $1$ | $1$ | $T_z; R_z$ | $\alpha_{xx} + \alpha_{yy}, \alpha_{zz}$ |
| $E$ | $\left\{\begin{matrix} 1 \\ 1 \end{matrix}\right.$ | $\begin{matrix} \varepsilon \\ \varepsilon^* \end{matrix}$ | $\left.\begin{matrix} \varepsilon^* \\ \varepsilon \end{matrix}\right\}$ | $(T_x, T_y); (R_x, R_y)$ | $(\alpha_{xx} - \alpha_{yy}, \alpha_{xy}), (\alpha_{yz}, \alpha_{zx})$ |

| $C_4$ | $1$ | $C_4$ | $C_2$ | $C_4^3$ | | |
|---|---|---|---|---|---|---|
| $A$ | $1$ | $1$ | $1$ | $1$ | $T_z; R_z$ | $\alpha_{xx} + \alpha_{yy}, \alpha_{zz}$ |
| $B$ | $1$ | $-1$ | $1$ | $-1$ | | $\alpha_{xx} - \alpha_{yy}, \alpha_{xy}$ |
| $E$ | $\left\{\begin{matrix} 1 \\ 1 \end{matrix}\right.$ | $\begin{matrix} i \\ -i \end{matrix}$ | $\begin{matrix} -1 \\ -1 \end{matrix}$ | $\left.\begin{matrix} -i \\ i \end{matrix}\right\}$ | $(T_x, T_y); (R_x, R_y)$ | $(\alpha_{yz}, \alpha_{xz})$ |

Gruppen $D_n$

| $D_2$ | $1$ | $C_2(z)$ | $C_2(y)$ | $C_2(x)$ | | |
|---|---|---|---|---|---|---|
| $A$ | $1$ | $1$ | $1$ | $1$ | | $\alpha_{xx}, \alpha_{yy}, \alpha_{zz}$ |
| $B_1$ | $1$ | $1$ | $-1$ | $-1$ | $T_z; R_z$ | $\alpha_{xy}$ |
| $B_2$ | $1$ | $-1$ | $1$ | $-1$ | $T_y; R_y$ | $\alpha_{xz}$ |
| $B_3$ | $1$ | $-1$ | $-1$ | $1$ | $T_x; R_x$ | $\alpha_{yz}$ |

**Tab. 6.3.1.** (1. Fortsetzung)

Gruppen $D_n$

| $D_3$ | $1$ | $2C_3$ | $3C_2$ | | |
|---|---|---|---|---|---|
| $A_1$ | 1 | 1 | 1 | | $\alpha_{xx}+\alpha_{yy}, \alpha_{zz}$ |
| $A_2$ | 1 | 1 | −1 | $T_z; R_z$ | |
| $E$ | 2 | −1 | 0 | $(T_x, T_y); (R_x, R_y)$ | $(\alpha_{xx}-\alpha_{yy}, \alpha_{xy}), (\alpha_{yz}, \alpha_{xz})$ |

| $D_4$ | $1$ | $2C_4$ | $C_2$ | $2C_2'$ | $2C_2''$ | | |
|---|---|---|---|---|---|---|---|
| $A_1$ | 1 | 1 | 1 | 1 | 1 | | $\alpha_{xx}+\alpha_{yy}, \alpha_{zz}$ |
| $A_2$ | 1 | 1 | 1 | −1 | −1 | $T_z; R_z$ | |
| $B_1$ | 1 | −1 | 1 | 1 | −1 | | $\alpha_{xx}-\alpha_{yy}$ |
| $B_2$ | 1 | −1 | 1 | −1 | 1 | | $\alpha_{xy}$ |
| $E$ | 2 | 0 | −2 | 0 | 0 | $(T_x, T_y); (R_x, R_y)$ | $(\alpha_{xz}, \alpha_{yz})$ |

Gruppen $C_i$ und $S_{2k}$

| $C_i$ | $1$ | $i$ | | |
|---|---|---|---|---|
| $A_g$ | 1 | 1 | $R_x, R_y, R_z$ | $\alpha_{xx}, \alpha_{yy}, \alpha_{zz}, \alpha_{xy}, \alpha_{xz}, \alpha_{yz}$ |
| $A_u$ | 1 | −1 | $T_x, T_y, T_z$ | |

| $S_4$ | $1$ | $S_4$ | $S_4^2$ | $S_4^3$ | | |
|---|---|---|---|---|---|---|
| $A$ | 1 | 1 | 1 | 1 | $R_z$ | $\alpha_{xx}+\alpha_{yy}, \alpha_{zz}$ |
| $B$ | 1 | −1 | 1 | −1 | $T_z$ | $\alpha_{xx}-\alpha_{yy}, \alpha_{xy}$ |
| $E$ | {1 | i | −1 | −i} | $(T_x, T_y); (R_x, R_y)$ | $(\alpha_{xz}, \alpha_{yz})$ |
| | {1 | −i | −1 | i} | | |

Gruppen $C_{nh}$

| $C_{2h}$ | $1$ | $C_2$ | $i$ | $\sigma_h$ | | |
|---|---|---|---|---|---|---|
| $A_g$ | 1 | 1 | 1 | 1 | $R_z$ | $\alpha_{xx}, \alpha_{yy}, \alpha_{zz}, \alpha_{xy}$ |
| $B_g$ | 1 | −1 | 1 | −1 | $R_x, R_y$ | $(\alpha_{xz}, \alpha_{yz})$ |
| $A_u$ | 1 | 1 | −1 | −1 | $T_z$ | |
| $B_u$ | 1 | −1 | −1 | 1 | $T_x, T_y$ | |

| $C_{3h}$ | $1$ | $C_3$ | $C_3^2$ | $\sigma_h$ | $S_3$ | $S_3^2$ | | $\varepsilon = e^{\frac{2\pi i}{3}}$ |
|---|---|---|---|---|---|---|---|---|
| $A'$ | 1 | 1 | 1 | 1 | 1 | 1 | $R_z$ | $\alpha_{xx}+\alpha_{yy}, \alpha_{zz}$ |
| $E'$ | {1 | $\varepsilon$ | $\varepsilon^*$ | 1 | $\varepsilon$ | $\varepsilon^*$} | $(T_x, T_y)$ | $(\alpha_{xx}-\alpha_{yy}, \alpha_{xy})$ |
| | {1 | $\varepsilon^*$ | $\varepsilon$ | 1 | $\varepsilon^*$ | $\varepsilon$} | | |
| $A''$ | 1 | 1 | 1 | −1 | −1 | −1 | $T_z$ | |
| $E''$ | {1 | $\varepsilon$ | $\varepsilon^*$ | −1 | $-\varepsilon$ | $-\varepsilon^*$} | $(R_x, R_y)$ | $(\alpha_{xz}, \alpha_{yz})$ |
| | {1 | $\varepsilon^*$ | $\varepsilon$ | −1 | $-\varepsilon^*$ | $-\varepsilon$} | | |

**Tab. 6.3.1.** (2. Fortsetzung)

Gruppen $C_{nh}$

| $C_{4h}$ | $1$ | $C_4$ | $C_2$ | $C_4^3$ | $i$ | $S_4^3$ | $\sigma_h$ | $S_4$ | | |
|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|
| $A_g$ | 1 | 1 | 1 | 1 | 1 | 1 | 1 | 1 | $R_z$ | $\alpha_{xx} + \alpha_{yy}, \alpha_{zz}$ |
| $B_g$ | 1 | −1 | 1 | −1 | 1 | −1 | 1 | −1 | | $\alpha_{xx} - \alpha_{yy}, \alpha_{xy}$ |
| $E_g$ | {1 | i | −1 | −i | 1 | i | −1 | −i} | $(R_x, R_y)$ | $(\alpha_{xz}, \alpha_{yz})$ |
| | {1 | −i | −1 | i | 1 | −i | −1 | i} | | |
| $A_u$ | 1 | 1 | 1 | 1 | −1 | −1 | −1 | −1 | $T_z$ | |
| $B_u$ | 1 | −1 | 1 | −1 | −1 | 1 | −1 | 1 | | |
| $E_u$ | {1 | i | −1 | −i | −1 | −i | 1 | i} | $(T_x, T_y)$ | |
| | {1 | −i | −1 | i | −1 | i | 1 | −i} | | |

Gruppen $C_{nv}$

| $C_{2v}$ | $1$ | $C_2$ | $\sigma(x, z)$ | $\sigma(y, z)$ | | |
|---|---|---|---|---|---|---|
| $A_1$ | 1 | 1 | 1 | 1 | $T_z$ | $\alpha_{xx}, \alpha_{yy}, \alpha_{zz}$ |
| $A_2$ | 1 | 1 | −1 | −1 | $R_z$ | $\alpha_{xy}$ |
| $B_1$ | 1 | −1 | 1 | −1 | $T_x, R_y$ | $\alpha_{xz}$ |
| $B_2$ | 1 | −1 | −1 | 1 | $T_y, R_z$ | $\alpha_{yz}$ |

| $C_{3v}$ | $1$ | $2C_3$ | $3\sigma_v$ | | |
|---|---|---|---|---|---|
| $A_1$ | 1 | 1 | 1 | $T_z$ | $\alpha_{xx} + \alpha_{yy}, \alpha_{zz}$ |
| $A_2$ | 1 | 1 | −1 | $R_z$ | |
| $E$ | 2 | −1 | 0 | $(T_x, T_y); (R_x, R_y)$ | $(\alpha_{xx} - \alpha_{yy}, \alpha_{xy}), (\alpha_{xz}, \alpha_{yz})$ |

| $C_{4v}$ | $1$ | $2C_4$ | $C_2$ | $2\sigma_v$ | $2\sigma_d$ | | |
|---|---|---|---|---|---|---|---|
| $A_1$ | 1 | 1 | 1 | 1 | 1 | $T_z$ | $\alpha_{xx} + \alpha_{yy}, \alpha_{zz}$ |
| $A_2$ | 1 | 1 | 1 | −1 | −1 | $R_z$ | |
| $B_1$ | 1 | −1 | 1 | 1 | −1 | | $\alpha_{xx} - \alpha_{yy}$ |
| $B_2$ | 1 | −1 | 1 | −1 | 1 | | $\alpha_{xy}$ |
| $E$ | 2 | 0 | −2 | 0 | 0 | $(T_x, T_y); (R_x, R_y)$ | $(\alpha_{xz}, \alpha_{yz})$ |

Gruppen $D_{nh}$

| $D_{2h}$ | $1$ | $C_2(z)$ | $C_2(y)$ | $C_2(z)$ | $i$ | $\sigma(x, y)$ | $\sigma(x, z)$ | $\sigma(y, z)$ | | |
|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|
| $A_g$ | 1 | 1 | 1 | 1 | 1 | 1 | 1 | 1 | | $\alpha_{xx}, \alpha_{yy}, \alpha_{zz}$ |
| $B_{1g}$ | 1 | 1 | −1 | −1 | 1 | 1 | −1 | −1 | $R_z$ | $\alpha_{xy}$ |
| $B_{2g}$ | 1 | −1 | 1 | −1 | 1 | −1 | 1 | −1 | $R_y$ | $\alpha_{xz}$ |
| $B_{3g}$ | 1 | −1 | −1 | 1 | 1 | −1 | −1 | 1 | $R_z$ | $\alpha_{yz}$ |
| $A_u$ | 1 | 1 | 1 | 1 | −1 | −1 | −1 | −1 | | |
| $B_{1u}$ | 1 | 1 | −1 | −1 | −1 | −1 | 1 | 1 | $T_z$ | |
| $B_{2u}$ | 1 | −1 | 1 | −1 | −1 | 1 | −1 | 1 | $T_y$ | |
| $B_{3u}$ | 1 | −1 | −1 | 1 | −1 | 1 | 1 | −1 | $T_x$ | |

**Tab. 6.3.1.** (3. Fortsetzung)

Gruppen $D_{nh}$

| $D_{3h}$ | **1** | $2C_3$ | $3C_2$ | $\sigma_h$ | $2S_3$ | $3\sigma_v$ | | |
|---|---|---|---|---|---|---|---|---|
| $A_1'$ | 1 | 1 | 1 | 1 | 1 | 1 | | $\alpha_{xx}+\alpha_{yy}, \alpha_{zz}$ |
| $A_2'$ | 1 | 1 | −1 | 1 | 1 | −1 | $R_z$ | |
| $E'$ | 2 | −1 | 0 | 2 | −1 | 0 | $(T_x, T_y)$ | $(\alpha_{xx}-\alpha_{yy}, \alpha_{xy})$ |
| $A_1''$ | 1 | 1 | 1 | −1 | −1 | −1 | | |
| $A_2''$ | 1 | 1 | −1 | −1 | −1 | 1 | $T_z$ | |
| $E''$ | 2 | −1 | 0 | −2 | 1 | 0 | $(R_x, R_y)$ | $(\alpha_{xz}, \alpha_{yz})$ |

| $D_{4h}$ | **1** | $2C_4$ | $C_2$ | $2C_2'$ | $2C_2''$ | $i$ | $2S_4$ | $\sigma_h$ | $2\sigma_v$ | $2\sigma_d$ | | |
|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|
| $A_{1g}$ | 1 | 1 | 1 | 1 | 1 | 1 | 1 | 1 | 1 | 1 | | $\alpha_{xx}+\alpha_{yy}, \alpha_{zz}$ |
| $A_{2g}$ | 1 | 1 | 1 | −1 | −1 | 1 | 1 | 1 | −1 | −1 | $R_z$ | |
| $B_{1g}$ | 1 | −1 | 1 | 1 | −1 | 1 | −1 | 1 | 1 | −1 | | $\alpha_{xx}-\alpha_{yy}$ |
| $B_{2g}$ | 1 | −1 | 1 | −1 | 1 | 1 | −1 | 1 | −1 | 1 | | $\alpha_{xy}$ |
| $E_g$ | 2 | 0 | −2 | 0 | 0 | 2 | 0 | −2 | 0 | 0 | $(R_x, R_y)$ | $(\alpha_{xz}, \alpha_{yz})$ |
| $A_{1u}$ | 1 | 1 | 1 | 1 | 1 | −1 | −1 | −1 | −1 | −1 | | |
| $A_{2u}$ | 1 | 1 | 1 | −1 | −1 | −1 | −1 | −1 | 1 | 1 | $T_z$ | |
| $B_{1u}$ | 1 | −1 | 1 | 1 | −1 | −1 | 1 | −1 | −1 | 1 | | |
| $B_{2u}$ | 1 | −1 | 1 | −1 | 1 | −1 | 1 | −1 | 1 | −1 | | |
| $E_u$ | 2 | 0 | −2 | 0 | 0 | −2 | 0 | 2 | 0 | 0 | $(T_x, T_y)$ | |

Gruppen $D_{nd}$

| $D_{2d}$ | **1** | $2S_4$ | $C_2$ | $2C_2'$ | $2\sigma_d$ | | |
|---|---|---|---|---|---|---|---|
| $A_1$ | 1 | 1 | 1 | 1 | 1 | | $\alpha_{xx}+\alpha_{yy}, \alpha_{zz}$ |
| $A_2$ | 1 | 1 | 1 | −1 | −1 | $R_z$ | |
| $B_1$ | 1 | −1 | 1 | 1 | −1 | | $\alpha_{xx}-\alpha_{yy}$ |
| $B_2$ | 1 | −1 | 1 | −1 | 1 | $T_z$ | $\alpha_{xy}$ |
| $E$ | 2 | 0 | −2 | 0 | 0 | $(T_x, T_y)$; $(R_x, R_y)$ | $(\alpha_{xz}, \alpha_{yz})$ |

| $D_{3d}$ | **1** | $2C_3$ | $3C_2'$ | $i$ | $2S_6$ | $3\sigma_d$ | | |
|---|---|---|---|---|---|---|---|---|
| $A_{1g}$ | 1 | 1 | 1 | 1 | 1 | 1 | | $\alpha_{xx}+\alpha_{yy}, \alpha_{zz}$ |
| $A_{2g}$ | 1 | 1 | −1 | 1 | 1 | −1 | $R_z$ | |
| $E_g$ | 2 | −1 | 0 | 2 | −1 | 0 | $(R_x, R_y)$ | $(\alpha_{xx}-\alpha_{yy}, \alpha_{xy})$; $(\alpha_{xz}, \alpha_{yz})$ |
| $A_{1u}$ | 1 | 1 | 1 | −1 | −1 | −1 | | |
| $A_{2u}$ | 1 | 1 | −1 | −1 | −1 | 1 | $T_z$ | |
| $E_u$ | 2 | −1 | 0 | −2 | 1 | 0 | $(T_x, T_y)$ | |

| $D_{4d}$ | **1** | $2S_8$ | $2S_4$ | $2S_8^3$ | $C_2$ | $4C_2'$ | $4\sigma_d$ | | |
|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|
| $A_1$ | 1 | 1 | 1 | 1 | 1 | 1 | 1 | | $\alpha_{xx}+\alpha_{yy}, \alpha_{zz}$ |
| $A_2$ | 1 | 1 | 1 | 1 | 1 | −1 | −1 | $R_z$ | |
| $B_1$ | 1 | −1 | 1 | −1 | 1 | 1 | −1 | | |
| $B_2$ | 1 | −1 | 1 | −1 | 1 | −1 | 1 | $T_z$ | |
| $E_1$ | 2 | $\sqrt{2}$ | 0 | $-\sqrt{2}$ | −2 | 0 | 0 | $(T_x, T_y)$ | |
| $E_2$ | 2 | 0 | −2 | 0 | 2 | 0 | 0 | | $(\alpha_{xx}-\alpha_{yy}, \alpha_{xy})$ |
| $E_3$ | 2 | $-\sqrt{2}$ | 0 | $\sqrt{2}$ | −2 | 0 | 0 | $(R_x, R_y)$ | $(\alpha_{xz}, \alpha_{yz})$ |

**Tab. 6.3.1.** (4. Fortsetzung)
Gruppen $D_{nd}$

| $D_{6d}$ | 1 | $2S_{12}$ | $2C_6$ | $2S_4$ | $2C_3$ | $2S_{12}^5$ | $C_2$ | $6C_2'$ | $6\sigma_d$ | | |
|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|
| $A_1$ | 1 | 1 | 1 | 1 | 1 | 1 | 1 | 1 | 1 | | $\alpha_{xx}+\alpha_{yy}$, $\alpha_{zz}$ |
| $A_2$ | 1 | 1 | 1 | 1 | 1 | 1 | 1 | −1 | −1 | $R_z$ | |
| $B_1$ | 1 | −1 | 1 | −1 | 1 | −1 | 1 | 1 | −1 | | |
| $B_2$ | 1 | −1 | 1 | −1 | 1 | −1 | 1 | −1 | 1 | $T_z$ | |
| $E_1$ | 2 | $\sqrt{3}$ | 1 | 0 | −1 | $-\sqrt{3}$ | −2 | 0 | 0 | $(T_x, T_y)$ | |
| $E_2$ | 2 | 1 | −1 | 1 | −1 | 1 | 2 | 0 | 0 | | $(\alpha_{xx}-\alpha_{yy}, \alpha_{xy})$ |
| $E_3$ | 2 | 0 | −2 | 0 | 2 | 0 | −2 | 0 | 0 | | |
| $E_4$ | 2 | −1 | −1 | 2 | −1 | −1 | 2 | 0 | 0 | | |
| $E_5$ | 2 | $-\sqrt{3}$ | 1 | 0 | −1 | $\sqrt{3}$ | −2 | 0 | 0 | $(R_x, R_y)$ | $(\alpha_{xz}, \alpha_{yz})$ |

**Tab. 7.1.1. Polarisierbarkeit isotroper Medien**

| Medium | $\alpha$ in $10^{-31}$ m$^3$ | Medium | $\alpha$ in $10^{-31}$ m$^3$ |
|---|---|---|---|
| $H_2$ | 7,9 | $CO_2$ | 26,5 |
| Ar | 16,2 | $NH_3$ | 22,6 |
| HF | 24,6 | $CH_4$ | 26,0 |
| HCl | 31,3 | $CCl_4$ | 105 |

**Tab. 7.2.1. Wellenzahlverschiebungen auf Grund der Rotation**

| $\Delta \frac{1}{\lambda}$ | | | | | | | | | |
|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|
| in cm$^{-1}$ | −169,2 | −131,6 | −94,0 | −56,4 | 0 | 56,4 | 94,0 | 131,6 | 169,2 |
| in $B$ | −18 | −14 | −10 | −6 | 0 | 6 | 10 | 14 | 18 |
| $l$ | 5 | 4 | 3 | 2 | | 0 | 1 | 2 | 3 |
| Zweig | $P$ | | | | $Q$ | $R$ | | | |

**Tab. 7.3.1. Charaktertafel der Symmetriegruppe $D_{6h}$**

| | 1 | $2C_6$ | $2C_3$ | $C_2$ | $2C_2'$ | $2C_2''$ | $i$ | $2S_3$ | $2S_6$ | $\sigma_h$ | $3\sigma_d$ | $3\sigma_v$ | | |
|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|
| $A_{1g}$ | 1 | 1 | 1 | 1 | 1 | 1 | 1 | 1 | 1 | 1 | 1 | 1 | | $\alpha_{xx}+\alpha_{yy}$, $\alpha_{zz}$ |
| $A_{2g}$ | 1 | 1 | 1 | 1 | −1 | −1 | 1 | 1 | 1 | 1 | −1 | −1 | $R_z$ | |
| $B_{1g}$ | 1 | −1 | 1 | −1 | 1 | −1 | 1 | −1 | 1 | −1 | 1 | −1 | | |
| $B_{2g}$ | 1 | −1 | 1 | −1 | −1 | 1 | 1 | −1 | 1 | −1 | −1 | 1 | | |
| $E_{1g}$ | 2 | 1 | −1 | −2 | 0 | 0 | 2 | 1 | −1 | −2 | 0 | 0 | $(R_x, R_y)$ | $(\alpha_{xz}, \alpha_{yz})$ |
| $E_{2g}$ | 2 | −1 | −1 | 2 | 0 | 0 | 2 | −1 | −1 | 2 | 0 | 0 | | $(\alpha_{xx}-\alpha_{yy}, \alpha_{xy})$ |
| $A_{1u}$ | 1 | 1 | 1 | 1 | 1 | 1 | −1 | −1 | −1 | −1 | −1 | −1 | | |
| $A_{2u}$ | 1 | 1 | 1 | 1 | −1 | −1 | −1 | −1 | −1 | −1 | 1 | 1 | $T_z$ | |
| $B_{1u}$ | 1 | −1 | 1 | −1 | 1 | −1 | −1 | 1 | −1 | 1 | −1 | 1 | | |
| $B_{2u}$ | 1 | −1 | 1 | −1 | −1 | 1 | −1 | 1 | −1 | 1 | 1 | −1 | | |
| $E_{1u}$ | 2 | 1 | −1 | −2 | 0 | 0 | −2 | −1 | 1 | 2 | 0 | 0 | $(T_x, T_y)$ | |
| $E_{2u}$ | 2 | −1 | −1 | 2 | 0 | 0 | −2 | 1 | 1 | −2 | 0 | 0 | | |

**Tab. 7.3.2. Multiplikationstafel der Tensorprodukte für die Gruppe $D_{6h}$**

| | $A_{1g}$ | $A_{2g}$ | $B_{1g}$ | $B_{2g}$ | $E_{1g}$ | $E_{2g}$ | $A_{1u}$ | $A_{2u}$ | $B_{1u}$ | $B_{2u}$ | $E_{1u}$ | $E_{2u}$ |
|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|
| $A_{1g}$ | $A_{1g}$ | $A_{2g}$ | $B_{1g}$ | $B_{2g}$ | $E_{1g}$ | $E_{2g}$ | $A_{1u}$ | $A_{2u}$ | $B_{1u}$ | $B_{2u}$ | $E_{1u}$ | $E_{2u}$ |
| $A_{2g}$ | | $A_{1g}$ | $B_{2g}$ | $B_{1g}$ | $E_{1g}$ | $E_{2g}$ | $A_{2u}$ | $A_{1u}$ | $B_{2u}$ | $B_{1u}$ | $E_{1u}$ | $E_{2u}$ |
| $B_{1g}$ | | | $A_{1g}$ | $A_{2g}$ | $E_{2g}$ | $E_{1g}$ | $B_{1u}$ | $B_{2u}$ | $A_{1u}$ | $A_{2u}$ | $E_{2u}$ | $E_{1u}$ |
| $B_{2g}$ | | | | $A_{1g}$ | $E_{2g}$ | $E_{1g}$ | $B_{2u}$ | $B_{1u}$ | $A_{2u}$ | $A_{1u}$ | $E_{2u}$ | $E_{1u}$ |
| $E_{1g}$ | | | | | $A_{1g}+A_{2g}+E_{2g}$ | $B_{1g}+B_{2g}+E_{1g}$ | $E_{1u}$ | $E_{1u}$ | $E_{2u}$ | $E_{2u}$ | $A_{1u}+A_{2u}+E_{2u}$ | $B_{1u}+B_{2u}+E_{1u}$ |
| $E_{2g}$ | | | | | | $A_{1g}+A_{2g}+E_{2g}$ | $E_{2u}$ | $E_{2u}$ | $E_{1u}$ | $E_{1u}$ | $B_{1u}+B_{2u}+E_{1u}$ | $A_{1u}+A_{2u}+E_{2u}$ |
| $A_{1u}$ | | | | | | | $A_{1g}$ | $A_{2g}$ | $B_{1g}$ | $B_{2g}$ | $E_{1g}$ | $E_{2g}$ |
| $A_{2u}$ | | | | | | | | $A_{1g}$ | $B_{2g}$ | $B_{1g}$ | $E_{1g}$ | $E_{2g}$ |
| $B_{1u}$ | | | | | | | | | $A_{1g}$ | $A_{2g}$ | $E_{2g}$ | $E_{1g}$ |
| $B_{2u}$ | | | | | | | | | | $A_{1g}$ | $E_{2g}$ | $E_{1g}$ |
| $E_{1u}$ | | | | | | | | | | | $A_{1g}+A_{2g}+E_{2g}$ | $B_{1g}+B_{2g}+E_{1g}$ |
| $E_{2u}$ | | | | | | | | | | | | $A_{1g}+A_{2g}+E_{2g}$ |

**Tab. 7.3.3. IR-Linien durch Schwingungsübergänge in $C_6H_6$**

| Symmetrie-rasse | Translation | $g$ | $n_k$ | $n_k'$ | $N_k' = \frac{n_k'}{g}$ |
|---|---|---|---|---|---|
| $E_{1u}$ | $(T_x, T_y)$ | 2 | 8 | 6 | 3 |
| $A_{2u}$ | $T_z$ | 1 | 2 | 1 | 1 |
| | | | | | Summe 4 |

**Tab. 7.3.4. Raman-Linien durch Schwingungsübergänge in $C_6H_6$**

| Symmetrie-rasse | RAMAN-Symmetrie | Uneigentliche Schwingungen | $g$ | $n_k$ | $n_k'$ | $N_k'$ |
|---|---|---|---|---|---|---|
| $A_{1g}$ | $\alpha_{xx} + \alpha_{yy}, \alpha_{zz}$ | | 1 | 2 | 2 | 2 |
| $E_{1g}$ | $(\alpha_{xz}, \alpha_{yz})$ | $(R_x, R_y)$ | 2 | 4 | 2 | 1 |
| $E_{2g}$ | $(\alpha_{xx} - \alpha_{yy}, \alpha_{xy})$ | | 2 | 8 | 8 | 4 |

**Tab. 7.3.5. IR- und Raman-Linien durch Schwingungsübergänge in $NH_3$**

| Symmetrie-rasse | RAMAN-symmetrie | Uneigentliche Schwingungen | $n_k$ | $n_k'$ | $N_k'$ | RAMAN-Linien | IR-Linien |
|---|---|---|---|---|---|---|---|
| $A_1$ | $\alpha_{xx} + \alpha_{yy}, \alpha_{zz}$ | $T_z$ | 3 | 2 | 2 | 2 | 2 |
| $E$ | $\{(\alpha_{xx} - \alpha_{yy}, \alpha_{xy}), (\alpha_{xz}, \alpha_{yz})\}$ | $\{(T_x, T_y), (R_x, R_y)\}$ | 8 | 4 | 2 | 2 | 2 |

**Tab. 7.3.6. IR- und Raman-Linien durch Schwingungsübergänge in $BF_3$**

| Symmetrie-rasse | RAMAN-Symmetrie | Uneigentliche Schwingungen | $n_k$ | $n_k'$ | $N_k'$ | RAMAN-Linien | IR-Linien |
|---|---|---|---|---|---|---|---|
| $A_1'$ | $\alpha_{xx} + \alpha_{yy}, \alpha_{zz}$ | | 1 | 1 | 1 | 1 | — |
| $E'$ | $(\alpha_{xx} - \alpha_{yy}, \alpha_{xy})$ | $(T_x, T_y)$ | 6 | 4 | 2 | 2 | 2 |
| $A_2''$ | | $T_z$ | 2 | 1 | 1 | — | 1 |
| $E''$ | $(\alpha_{xz}, \alpha_{yz})$ | $(R_x, R_y)$ | 2 | — | — | — | — |

**Tab. 8.2.2. Daten von Lasermaterialien**

| Material | Zusatz | relative Molekülmasse | Dichte in g cm$^{-3}$ | Brechzahl | Wellenlänge in nm |
|---|---|---|---|---|---|
| $Al_2O_3$ | $Cr^{3+}$ | 101,94 | 3,98 | 1,7634 | 694 |
| $Y_3Al_5O_{12}$ | $Nd^{3+}$ | 593,66 | 4,2 | 1,8186 | 1060 |
| $CaWO_4$ | $Nd^{3+}$ | 288,08 | 6,06 | 1,8933 | 1060 |

**Tab. 8.2.1. Daten von Lasern**

| Bezeichnung | Ausgangsleistung | λ in nm | Impulsdauer in μs | Impulsfolge in $min^{-1}$ | Bemerkungen |
|---|---|---|---|---|---|
| **Festkörperlaser** | | | | | |
| Rubinlaser | 1 kW | 694,3 | 500 | 4 | Dreiniveaulaser |
| ($Al_2O_3 : Cr^{3+}$) | 1 MW | 694,3 | 500 | 1 | |
| | 6 GW | 694,3 | 0,01 | 1 | |
| Neodymlaser ($Y_3Al_5O_{12} : Nd^{3+}$) | 2 kW | 1600 | kontinuierlich | | auch als Impulslaser |
| **Gaslaser** | | | | | |
| Helium-Neon-Laser | 0,02 W | 632,8 | kontinuierlich | | 0,01% Wirkungsgrad |
| | 1 W | 632,8 | kontinuierlich | | |
| Argonlaser | 5 W | 363,7 | kontinuierlich | | auch sichtbarer Bereich |
| Wasserstofflaser | 100 kW | 156 | 0,0025 | | |
| $CO_2$-Laser | 100 W | 10600 | kontinuierlich | | 20% Wirkungsgrad |
| | 10 kW | 10600 | kontinuierlich | | 10% Wirkungsgrad |
| **Flüssigkeitslaser** | | | | | |
| Farbstofflaser | bis 10 kW (im kont. Betr. bis 1 W) | kontinuierlich durchstimmbar | Impulsbetrieb | | optische Anregung |
| **Chemischer Laser** | | | | | |
| HF | 100 kW | 2600 | Impulsbetrieb | | |
| **Halbleiterlaser** | | | | | |
| (GaAs) | 0,1 W | 890 | kontinuierlich | | −196 °C, kleinste Abmessungen |
| | 10 W | 890 | 100 | 100 | 27 °C |
| | 150 W | 890 | 100 | 100 | −196 °C |

**Tab. 8.2.3. Querschnitte für Stöße zweiter Art beim Gaslaser**

| Reaktion | $\Delta W$ in eV | $\sigma$ in $10^{-20}$ $m^2$ |
|---|---|---|
| $He(2^3S_1) + Ne \rightarrow He + Ne(2\,s_2)$ | 0,039 | 0,14 |
| $He(2^3S_1) + Ne \rightarrow He + Ne(2\,s_3)$ | 0,058 | 0,14 |
| $He(2^1S_0) + Ne \rightarrow He + Ne(3\,s_2)$ | 0,048 | 4,1 |
| $He(2^1S_0) + Ne \rightarrow He + Ne(3\,s_4)$ | 0,044 | 0,01 |
| $He(2^3S_1) + Ar \rightarrow He + Ar^+ + e$ | | 6,6 |
| $He(2^1S_0) + Xe \rightarrow He + Xe^+ + e$ | | 103 |

**Tab. 9. Physikalische Konstanten**

| | | |
|---|---|---|
| Elektrische Feldkonstante | $\varepsilon_0$ | $8{,}8542 \cdot 10^{-12}$ A s $V^{-1}$ $m^{-1}$ |
| Magnetische Feldkonstante | $\mu_0$ | $1{,}2566 \cdot 10^{-6}$ V s $A^{-1}$ $m^{-1}$ |
| BOLTZMANN-Konstante | $k$ | $1{,}3807 \cdot 10^{-23}$ J $K^{-1}$ |
| Elektrisches Elementarquantum | $e$ | $1{,}6022 \cdot 10^{-19}$ C |
| Lichtgeschwindigkeit im Vakuum | $c_0$ | $2{,}99792 \cdot 10^{8}$ m $s^{-1}$ |
| AVOGADROsche Konstante | $N_A$ | $6{,}0220 \cdot 10^{26}$ $kmol^{-1}$ |
| Ruhmasse des Elektrons | $m_e$ | $9{,}1095 \cdot 10^{-31}$ kg |
| Ruhmasse des Protons | $m_p$ | $1{,}6726 \cdot 10^{-27}$ kg |
| Ruhmasse des Neutrons | $m_n$ | $1{,}6749 \cdot 10^{-27}$ kg |
| Allgemeine Gaskonstante | $R$ | $8{,}3144 \cdot 10^{3}$ J $kmol^{-1}$ $K^{-1}$ |
| PLANCKsches Wirkungsquantum | $h$ | $6{,}6262 \cdot 10^{-34}$ J s |
| FARADAY-Konstante | $F$ | $9{,}6485 \cdot 10^{4}$ C/mol |
| RYDBERG-Konstante | $R$ | $1{,}0974 \cdot 10^{7}$ $m^{-1}$ |
| Wellenwiderstand des Vakuums | $Z_0$ | $376{,}731\ \Omega$ |
| Atomare Masseneinheit | u | $1{,}66057 \cdot 10^{-27}$ kg |

**Tab. 10. Bezeichnung der wichtigsten Größen**

| | |
|---|---|
| $A$ | Auflösungsvermögen, Fläche, Amplitude, relative Atommasse, eindimensionale symmetrische Schwingung |
| $A_{12}$ | EINSTEIN-Koeffizient |
| $a$ | Abstand, Element, Radius |
| $B$ | eindimensionale antimetrische Schwingung |
| $\boldsymbol{B}$ | magnetische Flußdichte |
| $B_f$ | EINSTEIN-Koeffizient der induzierten Emission |
| $B_{12}$ | EINSTEIN-Koeffizient |
| $b$ | Abstand, Element |
| $\boldsymbol{b}$ | Basisvektor |
| $C_n$ | Symmetriegruppe |
| $\boldsymbol{C}_n$ | Hauptdrehachse, Drehung |
| $c$ | Lichtgeschwindigkeit, Abstand |
| $D$ | Amplitude, Kraftkoeffizient |
| $\boldsymbol{D}$ | dielektrische Verschiebungsdichte |
| $D_n$ | Symmetriegruppe |
| $d$ | Durchlässigkeit, Spaltbreite |
| $E$ | Beleuchtungsstärke, Amplitude, zweidimensionale Schwingung |
| $\boldsymbol{E}$ | elektrische Feldstärke |
| $e$ | Elementarladung |
| $\boldsymbol{e}$ | Einheitsvektor |
| $F$ | Brennpunkt, FARADAY-Drehung, dreidimensionale Schwingung |
| $\boldsymbol{F}$ | Gesamtdrehimpuls |
| $G$ | GREENsche Funktion, vierdimensionale Schwingung, Gruppe |
| $\boldsymbol{G}$ | Gyrationsvektor |
| $g$ | Entartungsgrad, Intensitätsfunktion |
| $\boldsymbol{H}$ | magnetische Feldstärke |
| $h$ | PLANCKsches Wirkungsquantum, Ordnung |
| $I$ | Kernspin-Quantenzahl, Trägheitsmoment |
| $I_e$ | Strahlstärke |
| $I_L$ | Lichtstärke |
| $\boldsymbol{i}$ | Inversion, Einheitsvektor |
| $J$ | innere Quantenzahl des Vielelektronensystems |
| $\boldsymbol{J}$ | Stromdichte, Gesamtdrehimpuls |

| | |
|---|---|
| $j$ | innere Quantenzahl des Einelektronensystems |
| $\boldsymbol{j}$ | Einheitsvektor |
| $\boldsymbol{k}$ | Wellenzahlvektor, Einheitsvektor |
| $k''$ | Absorptionskoeffizient |
| $L$ | Länge, LAGRANGEsche Funktion, LAGUERREsche Funktion |
| $L_e$ | Strahldichte |
| $\boldsymbol{L}$ | Drehimpuls, Bahndrehimpuls |
| $l$ | Entfernung, Nebenquantenzahl |
| $\Delta l$ | Kohärenzlänge |
| $M$ | magnetische Quantenzahl des Vielelektronensystems |
| $m$ | Masse, magnetische Quantenzahl des Einelektronensystems |
| $\boldsymbol{m}$ | Dipolmoment |
| $N$ | Anzahl, Konzentration |
| $n$ | Brechzahl, Konzentration, Zähligkeit, Hauptquantenzahl |
| $\boldsymbol{n}$ | Normale, Flächennormale |
| $n_p$ | Besetzungsdifferenz |
| $P$ | Wahrscheinlichkeit, Permutationsgruppe, Leistung |
| $\boldsymbol{P}$ | Polarisation |
| $p$ | Abstand, Anzahl, Druck |
| $\boldsymbol{p}$ | Impuls |
| $Q$ | Strahlungsmenge |
| $q, q_i$ | Normalkoordinate |
| $R$ | Amplitude, Pumprate, RYDBERG-Konstante |
| $r$ | Reflexionsvermögen, Multiplizität, Kugelkoordinate |
| $\boldsymbol{r}$ | Ortsvektor |
| $\boldsymbol{S}$ | Spinresultante, Strahlungs- bzw. Energieflußdichte |
| $S_n$ | Symmetriegruppe |
| $s$ | Spinquantenzahl |
| $\boldsymbol{s}$ | Strahlrichtung, Spin |
| $\Delta s$ | Gangunterschied |
| $T$ | Temperatur, mittlere Aufenthaltsdauer |
| $T_A$ | Amplitudentransmission |
| $t$ | Zeit |
| $U$ | Unterraum |
| $u$ | Phasengeschwindigkeit |
| $V$ | Volumen, Vergrößerung, VERDETsche Konstante, Spektralempfindlichkeit |
| $v$ | Signalgeschwindigkeit |
| $W$ | Energie |
| $W_p$ | Pumpleistung |
| $w_e$ | Energiedichte |
| $\boldsymbol{X}, \boldsymbol{Y}$ | Vektor |
| $x, y$ | Koordinate |
| $Z$ | Wellenwiderstand, Ordnungszahl, Anzahl |
| $z$ | Koordinate |
| $\alpha$ | Winkel, Polarisierbarkeit, SOMMERFELDsche Feinstrukturkonstante |
| $\tilde{\alpha}$ | spezifisches Drehvermögen |
| $\beta$ | Winkel, Absorptionskoeffizient, Abbildungsmaßstab |
| $\gamma$ | Winkel, elektrische Leitfähigkeit, Übergangshäufigkeit |
| $\delta$ | Phasenwinkel, Abklingkonstante |
| $\varepsilon$ | Dielektrizitätskonstante |
| $\zeta$ | Auslenkung |
| $\eta$ | Auslenkung |
| $\theta$ | Drehwinkel |

| | |
|---|---|
| $\vartheta$ | Polarkoordinate |
| $\varkappa$ | Absorptionsindex, Klassensumme |
| $\lambda$ | Wellenlänge |
| $\mu$ | magnetische Permeabilität |
| $\mu_B$ | BOHRsches Magneton |
| $\nu$ | Stoßfrequenz |
| $\xi$ | Auslenkung |
| $\pi$ | Element der Gruppenalgebra |
| $\varrho$ | Energiedichte, Radius |
| $\sigma$ | Wirkungsquerschnitt, Element, Strahlungsindex |
| $\boldsymbol{\sigma}$ | Spiegelung, Symmetrieoperator |
| $\boldsymbol{\sigma}_v$, $\boldsymbol{\sigma}_d$ | vertikale Spiegelung |
| $\boldsymbol{\sigma}_h$ | horizontale Spiegelung |
| $\tau$ | Zeitabschnitt, Element |
| $\Phi$ | Strahlungsfluß |
| $\Phi_e$ | Lichtstrom |
| $\varphi$ | Phasenverschiebung, Drehwinkel, Polarkoordinate, Zylinderkoordinate |
| $\chi$ | Spur einer Transformationsmatrix, Charakter |
| $\psi$ | Auslenkung, Feldkomponente |
| $\omega$ | Kreisfrequenz, Winkelgeschwindigkeit |
| $\Omega$ | Raumwinkel |

# Literatur- und Quellenverzeichnis

*Reihe „Physik in Beispielen“*

Leipzig: VEB Fachbuchverlag; Thun und Frankfurt/M: Verlag Harri Deutsch

[1] HAJKO, V.: Mechanik und Wärmelehre. 1975
[2] HAJKO, V.; SCHILLING, H.: Elektrik — Optik — Quantentheorie. 1975
[3] SCHILLING, H.: Statistische Physik. 1972
[4] SCHILLING, H.: Elektromagnetische Felder und Wellen. 1975
[5] SCHILLING, H.: Festkörperphysik. 1977

*Mathematische und physikalische Grundlagen*

[6] BORN, M.: Optik. Berlin, Heidelberg, New York: Springer-Verlag 1972
[7] BORN, M.; WOLF, E.: Principles of Optics. Oxford: Pergamon Press 1964
[8] BRONSTEIN, I. N.; SEMENDJAJEW, K. A.: Taschenbuch der Mathematik. Leipzig: BSB B. G. Teubner Verlagsgesellschaft; Thun und Frankfurt/M.: Verlag Harri Deutsch 1976
[9] GOODMAN, J. N.: Introduction to Fourier Optics. New York, London: McGraw-Hill Book Co., Inc., 1968
[10] JOOS, G.: Lehrbuch der theoretischen Physik. Leipzig: Akademische Verlagsgesellschaft Geest & Portig K.-G. 1964; Wiesbaden: Akademische Verlagsgesellschaft 1977
[11] LANDAU, L. D.; LIFSCHITZ, E. M.: Lehrbuch der theoretischen Physik. Bd. II: Klassische Feldtheorie. Bd. VIII: Elektrodynamik der Kontinua. Berlin: Akademie-Verlag 1973 und 1974
[12] MACKE, W.: Wellen. Leipzig: Akademische Verlagsgesellschaft Geest & Portig K.-G.1961
[13] MENDE, D.; SIMON, G.: Physik. Gleichungen und Tabellen. Leipzig: VEB Fachbuchverlag 1976
[14] POHL, R. W.: Einführung in die Physik. Bd. 3: Optik und Atomphysik. Berlin, Heidelberg, New York: Springer-Verlag 1976
[15] RECKNAGEL, A.: Physik. Optik. Berlin: VEB Verlag Technik 1977
[16] SCHULZ, G.: Paradoxa aus der Optik. Leipzig: Johann Ambrosius Barth 1974
[17] SHEWANDROW, N. D.: Die Polarisation des Lichtes. Berlin: Akademie-Verlag 1973
[18] SOMMERFELD, A.: Vorlesungen über theoretische Physik. Bd. 4: Optik. Leipzig: Akademische Verlagsgesellschaft Geest & Portig K.-G. 1964; Thun und Frankfurt/M.: Verlag Harri Deutsch 1978 (Nachdruck)
[19] ZELLER, W.; FRANKE, A.: Das physikalische Rüstzeug des Ingenieurs. Leipzig: VEB Fachbuchverlag; Darmstadt: Technik-Tabellen-Verlag 1977

*Spektroskopie*

[20] BARROW, R. F.; LONG, D. A.; MILLAN, P. J.: Molecular Spectroscopy. Specialist Periodical Reports, Chemical Society 1973 ff.
[21] BORSDORF, R.; SCHOLZ, M.: Spektroskopische Methoden in der organischen Chemie. Berlin: Akademie-Verlag; Braunschweig: Vieweg + Sohn 1974
[22] DEMTRÖDER, W.: Grundlagen und Techniken der Laserspektroskopie. Berlin, Heidelberg, New York: Springer-Verlag 1977
[23] FADINI, A.: Molekülkraftkonstanten. Darmstadt: Dr. Dietrich Steinkopff Verlag 1976
[24] GÜNZLER, H.; BÖCK, H.: IR-Spektroskopie. Weinheim: Verlag Chemie 1975
[25] HINDMARSH, W. R.: Atomspektren. Berlin: Akademie-Verlag; Braunschweig: Vieweg und Sohn 1972
[26] KIPSCH, D.: Lichtemissions-Spektrometrie. Leipzig: VEB Deutscher Verlag für Grundstoffindustrie 1974
[27] MATHIAK, K.; STINGL, P.: Gruppentheorie für Chemiker, Physiko-Chemiker, Mineralogen. Berlin: VEB Deutscher Verlag der Wissenschaften 1969
[28] MEISEL, A.; LEONHARDT, G.; SZARGAN, R.: Röntgenspektren und chemische Bindung. Leipzig: Akademische Verlagsgesellschaft Geest & Portig K.-G. 1977
[29] SCHUTTE, C. J. H.: The Theory of Molecular Spectroscopy. Amsterdam: North Holland American Elsevier 1976
[30] SUSCHTSCHINSKIJ, M. M.: Ramanspektren von Molekülen und Kristallen. Berlin: Akademie-Verlag 1974

*Laser und Holografie*

[31] BRUNNER, W.; RADLOFF, W.; JUNGE, K.: Quantenelektronik. Berlin: VEB Deutscher Verlag der Wissenschaften 1975
[32] FAIN, W. M.; CHANIN, J. I.: Quantenelektronik. Leipzig: BSB B. G. Teubner Verlagsgesellschaft 1969
[33] FRANCON, M.: Holographie. Berlin, Heidelberg, New York: Springer-Verlag 1972
[34] FRANCON, M.: Moderne Anwendungen der physikalischen Optik. Berlin: Akademie-Verlag 1971
[35] KLEEN, W.; MÜLLER, R. (Hrsg.): Laser. Berlin, Heidelberg, New York: Springer-Verlag 1969
[36] KLIMONTOWITSCH, J. L.: Laser und nichtlineare Optik. Leipzig: BSB B. G. Teubner Verlagsgesellschaft 1971
[37] LENK, H.: Holographie. Leipzig: VEB Georg Thieme 1971
[38] MENZEL, E.; MIRANDÉ, W.; WEINGÄRTNER, I.: Fourier-Optik und Holographie. Berlin. Heidelberg, New York: Springer-Verlag 1973
[39] NÁRAY, Zs.: Laser und ihre Anwendungen. Leipzig: Akademische Verlagsgesellschaft Geest & Portig K.-G. 1976
[40] PAUL, H.: Lasertheorie, 2 Bde. Berlin: Akademie-Verlag; Braunschweig: Vieweg & Sohn 1969
[41] SCHILLING, H.: Physik strahlgesteuerter Informationsspeicher. Berlin: Akademie-Verlag 1975
[42] SCHUBERT, M.; WILHELMI, B.: Einführung in die nichtlineare Optik. 2 Bde. Leipzig: BSB B. G. Teubner Verlagsgesellschaft 1971 und 1978
[43] WEBER, H.; HERZIGER, G.: Laser. Weinheim: Physik-Verlag 1972

# Sachwortverzeichnis



Die Lasertechnik hat in den vergangenen Jahrzehnten optische Meß- und Abbildungsverfahren entwickelt, die in allen Naturwissenschaften und auf vielen Gebieten der Technik Anwendung gefunden haben. Moderne Untersuchungsmethoden der Spektroskopie bilden die Grundlage der Strukturanalyse, sowohl bei der Erforschung des Aufbaus der Materie als auch bei der Werkstoff- und Materialprüfung, in der Biologie und in der Medizin. Mit der Entwicklung der Holografie wurde es möglich, Bilder großer Tiefenschärfe und damit bester räumlicher Anschaulichkeit zu erzeugen, die Speicherung und Verschlüsselung von Informationen zu verbessern und die Genauigkeit und Geschwindigkeit bei der Nachrichtenübertragung zu erhöhen.
Das vorliegende Lehrbuch vermittelt die Grundgesetze der Optik in Form kurzgefaßter Lehrtexte und ausgewählter Beispiele aus der Technik. Die Lösung der aufgeführten Probleme erfolgt von der Ableitung der theoretischen Grundlagen bis zur Durchrechnung von speziellen Aufgaben. Behandelt werden die Gesetze der Reflexion und der Brechung, der Interferenz und der Beugung des Lichtes, die wichtigsten optischen Instrumente, die spontane und die induzierte Emission, Atom- und Molekülspektren, die Physik des Lasers und die Grundlagen der Holografie.

*Leserkreis:*

**Studenten, Lehrer, Ingenieure der Fachrichtungen Physik, Chemie, Elektrotechnik, Maschinen- und Apparatebau, Feinmechanik und Feinmeßtechnik, Verfahrenstechnik, Automatisierungstechnik, Nachrichten- und Informationstechnik, Mathematik und Kybernetik.**